



# **Couplage 3D neutronique thermohydraulique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants**

N. Capellan

## **► To cite this version:**

N. Capellan. Couplage 3D neutronique thermohydraulique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris Sud - Paris XI, 2009. Français. NNT : . tel-00474353

**HAL Id: tel-00474353**

**<https://theses.hal.science/tel-00474353>**

Submitted on 19 Apr 2010

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# THÈSE

*présentée par*

Nicolas Capellan

*en vue d'obtenir le grade de*

Docteur en sciences de l'Université Paris XI – Orsay

## **Couplage 3D neutronique thermohydraulique. Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants.**

Date de soutenance : 25 novembre 2009

Composition du jury :

Président du jury :	Pierre Désesquelles	Université Paris XI
Rapporteurs :	Cheikh Diop	CEA/INSTN Saclay
	Walter Ambrosini	Universita' di Pisa
Examineurs :	Gérard Barreau	CNRS/CENBG Bordeaux
	Claude Garzenne	EDF R&D Clamart
Directeur de thèse :	Jonathan Wilson	CNRS/IPN Orsay



*A ma grand mère,  
A Renaud et Sophia.*



# Remerciements

Ces travaux de thèse ont été réalisés à l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay, au sein du groupe de Physique de l'Aval du Cycle et de la Spallation. Je remercie Dominique Guillemaud-Mueller, directrice de l'IPN, et Bernard Berthier, directeur de la Division de la Recherche à l'IPN et directeur de mon école doctorale, pour m'y avoir accueilli.

Je tiens à remercier mon directeur de thèse Jonathan Wilson pour son implication et son attention tout au long de mon travail de thèse. Je le remercie pour sa confiance, son soutien réel et continu, principalement au cours de la délicate période de fin de thèse.

J'exprime mes plus vifs remerciements à Cheikh Diop et Walter Ambrosini, qui m'ont fait l'honneur d'être les rapporteurs de ma thèse, pour leur important travail de relecture et leurs commentaires pertinents. Mes remerciements vont également à Pierre Désesquelles, Gérard Barreau et Claude Garzenne pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

J'exprime ma profonde gratitude aux personnes suivantes, qui ont participé à l'encadrement de ma thèse : Sylvain David, Alexis Nuttin et enfin Olivier Méplan, que je remercie tout particulièrement pour son entière disponibilité, ses conseils avisés et son aide précieuse.

Je n'oublie pas non plus tous ceux avec qui je n'ai pas travaillé directement mais qui m'ont fréquemment apporté leur aide, en particulier Adrien Bidaud, Laurent Tassan-Got, Laurent Audouin, Charles-Olivier Bacri, Evgueni Ivanov.

J'adresse pour finir une pensée reconnaissante à tous mes amis et à ma famille pour leur indéfectible soutien, et, last but not least, à Julie.



# Table des matières

<b>INTRODUCTION</b>	<b>1</b>
<b>1 PROBLEMATIQUES DU COUPLAGE</b>	<b>5</b>
1.1 Rappels sur le principe de fonctionnement d'un réacteur nucléaire . . . . .	5
1.2 Historique . . . . .	6
1.3 Méthodologie générale . . . . .	8
1.3.1 Recouvrement des maillages . . . . .	9
1.3.2 Dépendance des sections efficaces en fonction de la température . . .	10
1.3.3 Méthode de couplage . . . . .	10
1.4 Grandeurs physiques recherchées et codes associés . . . . .	12
<b>2 LES CODES DE SIMULATION</b>	<b>17</b>
2.1 Calculs de neutronique . . . . .	17
2.1.1 Introduction . . . . .	17
2.1.2 Logiciels disponibles . . . . .	18
2.1.3 Modélisation de la physique mise en jeu . . . . .	22
2.2 Calculs de thermohydraulique . . . . .	26
2.2.1 Introduction . . . . .	26
2.2.2 Logiciels disponibles . . . . .	27
2.2.3 Modélisation de la physique mise en jeu . . . . .	29
2.3 L'outil MURE . . . . .	38
2.3.1 Introduction . . . . .	38
2.3.2 Traitement de l'évolution des matériaux . . . . .	40
2.3.3 Accélération des calculs par une méthode multi-groupes . . . . .	41
<b>3 COUPLAGE DES CODES</b>	<b>43</b>
3.1 MURE comme logiciel de supervision . . . . .	43
3.2 Traitement simplifié de la thermohydraulique . . . . .	45
3.2.1 Relations de base résolues . . . . .	46
3.2.2 Echauffement du fluide caloporteur dans une tranche axiale . . . . .	47
3.2.3 Conduction dans la gaine . . . . .	49



3.2.4	Chute de température dans la lame de gaz entre la pastille combustible et la gaine . . . . .	50
3.2.5	Conduction dans la pastille combustible . . . . .	51
3.2.6	Evaluation des pertes de charges . . . . .	51
3.2.7	Réflexions sur les modélisations thermohydrauliques . . . . .	52
3.3	Gestion de la géométrie . . . . .	54
3.3.1	Neutronique . . . . .	55
3.3.2	Thermohydraulique . . . . .	56
3.4	Communication entre les disciplines . . . . .	57
3.4.1	Communications de la neutronique vers la thermohydraulique . . . .	58
3.4.2	Communications de la thermohydraulique vers la neutronique . . . .	59
3.5	Gestion des sections efficaces en fonction de la température . . . . .	60
3.5.1	Traitement de la dépendance en température des sections efficaces par l'outil NJOY . . . . .	61
3.5.2	Cas particulier des tables $S(\alpha, \beta)$ . . . . .	62
3.5.3	Traitement de la dépendance en température des sections efficaces par une méthode d'interpolation . . . . .	63
3.6	Recherche de la convergence et difficultés associées . . . . .	69
3.6.1	Observations préliminaires . . . . .	70
3.6.2	Présentation du cadre de l'investigation . . . . .	71
3.6.3	Calculs paramétriques basés sur la statistique . . . . .	72
3.6.4	La convergence de la distribution des sources de fission . . . . .	73
3.6.5	Calculs test avec une source convergée . . . . .	76
3.7	Conclusion sur les conditions à respecter pour les calculs couplés . . . . .	78
<b>4</b>	<b>VALIDATION DU SCHEMA COUPLE</b>	<b>83</b>
4.1	Présentation du benchmark . . . . .	84
4.1.1	Configuration du cœur . . . . .	84
4.1.2	Description des calculs du benchmark . . . . .	88
4.2	Simulation 3D couplée sur 4 assemblages . . . . .	88
4.2.1	Présentation du cadre d'étude . . . . .	88
4.2.2	Vérification de la convergence et comparaison avec le benchmark . .	88
4.2.3	Profils de puissance . . . . .	91
4.3	Simulation 3D couplée du cœur . . . . .	93
4.3.1	Paramètres de simulation . . . . .	93
4.3.2	Calculs 3D à puissance nominale . . . . .	95
4.3.3	Calculs 2D à températures fixées . . . . .	101
4.3.4	Calculs 3D à puissance nulle . . . . .	103
<b>5</b>	<b>OUTILS POUR LES TRANSITOIRES</b>	<b>105</b>
5.1	Calcul du temps de génération des neutrons . . . . .	106
5.1.1	Méthode des perturbations . . . . .	106

---

5.1.2	Méthode directe . . . . .	106
5.2	Calcul automatisé des fractions de neutrons retardés . . . . .	107
5.2.1	Rappels . . . . .	107
5.2.2	Méthode de pondération . . . . .	108
5.3	Résolution de la cinétique point avec contre-réactions thermiques . . . . .	111
5.3.1	Equations de la cinétique point . . . . .	111
5.3.2	Modèle LUMP pour les contre réactions thermiques . . . . .	112
5.4	Application à l'accident d'éjection de barres . . . . .	113
<b>CONCLUSION</b>		<b>117</b>
<b>ANNEXES</b>		<b>123</b>
<b>A Couplage entre cellules</b>		<b>123</b>
<b>B Benchmark : résultats des calculs 3D (HFP)</b>		<b>125</b>
<b>C Benchmark : résultats des calculs 2D</b>		<b>129</b>
<b>D Benchmark : résultats des calculs 3D (HZIP)</b>		<b>131</b>
<b>E Données de base pour les calculs de <math>\beta</math></b>		<b>135</b>
<b>F Exemple d'un jeu de données MURE</b>		<b>139</b>
<b>G Exemple d'un jeu de données MURE-COBRA</b>		<b>141</b>
<b>H Exemple d'un jeu de données MURE-BATH</b>		<b>153</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE</b>		<b>161</b>



# Table des figures

1.1	Schéma de principe d'une centrale nucléaire à eau sous pression . . . . .	6
1.2	Exemple de réseaux utilisés en neutronique et thermohydraulique pour une même géométrie . . . . .	9
1.3	Découpage radial et axial . . . . .	11
1.4	Distribution de puissance axiale - intérêt de la prise en compte des sections efficaces dépendantes en température . . . . .	12
1.5	Élargissement par effet Doppler d'une résonance de l'uranium 238 . . . . .	13
1.6	Itérations neutronique / thermohydraulique jusqu'à convergence . . . . .	13
1.7	Communication des données en couplage externe . . . . .	14
1.8	Correspondance des crayons (géométrie neutronique) avec les structures de COBRA (géométrie thermohydraulique) . . . . .	14
2.1	Représentation des maillages $S_4$ , $S_8$ , $S_{16}$ , et $S_{32}$ sur un huitième de sphère .	21
2.2	Schéma de traitement de l'équation de transport par l'approche probabiliste en calcul critique (MCNP) . . . . .	22
2.3	Représentation géométrique de la modélisation sous-canal . . . . .	29
2.4	Exemples de géométries simples avec un code de CFD, réalisées avec le mailleur GMSH. . . . .	30
2.5	Volumes de contrôle (vue latérale) . . . . .	31
2.6	Volumes de contrôle (vue d'en haut) . . . . .	32
2.7	Résolution des équations dans les volumes de contrôle . . . . .	35
2.8	Maillage dans les structures pour le traitement des échanges thermiques . .	36
2.9	Courbe de Nukiyama . . . . .	37
2.10	Les différents régimes de l'ébullition convective . . . . .	38
2.11	Interface MureGui pour le post-traitement des résultats . . . . .	39
2.12	Création de la géométrie avec l'outil MURE . . . . .	40
2.13	Principe général du traitement de l'évolution dans MURE . . . . .	41
2.14	Découpage énergétique pour les calculs en multi-groupes . . . . .	42
3.1	Canaux élémentaires pour les modélisations thermohydrauliques . . . . .	47
3.2	Couche limite thermique . . . . .	48

3.3	Illustration de résultats de calculs couplés avec BATH sur un assemblage REP . . . . .	52
3.4	Comportement des crayons et aiguilles combustible sous irradiation . . . . .	53
3.5	Illustration des cellules élémentaire pré-définies . . . . .	55
3.6	Illustrations de géométries . . . . .	57
3.7	Modélisation géométrique sous COBRA . . . . .	58
3.8	Ordonnancement des calculs . . . . .	59
3.9	Illustration de résultat d'un calcul couplé avec COBRA - zoom sur un assemblage arbitraire du cœur . . . . .	61
3.10	Mesure de la rapidité de convergence suivant la méthode employée . . . . .	65
3.11	Mesure de la variation maximale sur les dépôts de puissance en fonction de l'itération . . . . .	67
3.12	Mesure des écarts des dépôts de puissance entre les deux méthodes de calcul . . . . .	68
3.13	Profil de puissance axial en fonction des itérations . . . . .	70
3.14	Profils de puissance axiaux suivant différentes germes aléatoires (différentes entrées sur la carte DBCN) . . . . .	71
3.15	Profils de puissance en fonction de la disposition des sources de neutrons . . . . .	72
3.16	Indicateurs sélectionnés pour la mesure des effets de fluctuations statistiques . . . . .	74
3.17	Validité des profils de puissance en fonction du nombre de particules simulés . . . . .	75
3.18	Profil de puissance axial d'un SFR en fonction des itérations neutronique thermohydraulique (MURE-BATH) . . . . .	76
3.19	Convergence neutronique thermohydrauliques (MURE-COBRA) pour un assemblage de BWR . . . . .	80
3.20	Profil axial de flux en fonction du temps d'irradiation . . . . .	81
3.21	Profil axial de flux en fonction du temps d'irradiation . . . . .	81
4.1	Configuration du cœur . . . . .	85
4.2	Configuration des assemblages . . . . .	85
4.3	Géométrie des cellules . . . . .	87
4.4	Coupe radiale de la géométrie simulée . . . . .	89
4.5	Convergence cellule par cellule . . . . .	90
4.6	Comparaison radiale des dépôts de puissance au sein de l'assemblage A1 . . . . .	90
4.7	Profils axial de puissance . . . . .	91
4.8	Cartes des puissances par assemblage . . . . .	92
4.9	Cartes des dépôts de puissance et températures de sortie associées . . . . .	93
4.10	Groupement de cellules dans les assemblages UOX et MOX . . . . .	94
4.11	Variations totales de puissance par assemblage au cours des itérations . . . . .	95
4.12	Mesure de l'écart maximal de puissance dans une cellule d'assemblage au cours des itérations . . . . .	96
4.13	Distribution de puissance dans le cœur (HFP) . . . . .	97
4.14	Comparaison des dépôts de puissance radiaux (HFP) . . . . .	98
4.15	Dépôts de puissance au sein de l'assemblage D4 (HFP) . . . . .	100

4.16	Comparaison des dépôts de puissance radiaux à températures fixées . . . .	101
4.17	Comparaison des dépôts de puissance radiaux à puissance nulle et les barres de contrôle insérées . . . . .	104
4.18	Impact de l'éjection des barres de contrôle de l'assemblage E5 sur la nappe de puissance (calculs statiques MCNP) . . . . .	104
5.1	Évolution de la fraction de neutrons retardés au cours du cycle . . . . .	111
5.2	Évolution de la réactivité au cours du transitoire . . . . .	114
5.3	Évolution de la puissance au cours du transitoire . . . . .	115
5.4	Évolution de la température du combustible au cours du transitoire . . . . .	116
A.1	Cadre de simulation : calculs à statistique constante . . . . .	124
A.2	Impact des critères de simulation sur les profils de flux au cours de l'irradiation	124
B.1	Comparaison des dépôts de puissance radiaux (HFP) . . . . .	125
C.1	Comparaison des dépôts de puissance radiaux à températures fixées (calcul 2D) . . . . .	129
D.1	Comparaison des dépôts de puissance radiaux (HZP) . . . . .	132
F.1	Gestion de la géométrie dans MURE . . . . .	139
F.2	Construction des cellules dans MURE . . . . .	140
F.3	Exemple d'un réseau simple généré avec MURE . . . . .	140
G.1	Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 1 . . . . .	142
G.2	Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 2 . . . . .	142
G.3	Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 3 . . . . .	143
G.4	Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 4 . . . . .	143
G.5	Calcul couplé avec la classe COBRA . . . . .	144
G.6	Illustration d'un calcul couplé avec COBRA : profils 3D de température crayon par crayon . . . . .	145
G.7	Illustration d'un calcul couplé avec COBRA : flux critique et minimum DNBR (Assemblage B2 - HFP) . . . . .	146
G.8	Illustration d'un calcul couplé avec COBRA : courants transverses à l'in- térieur d'assemblages arbitraires . . . . .	147
H.1	Températures moyennes . . . . .	155
H.2	Températures du combustible intérieure et extérieure . . . . .	155
H.3	Profils axiaux de puissance et radiaux de températures . . . . .	155



# Liste des tableaux

1.1	Exemples de quelques filières de réacteurs nucléaires . . . . .	7
3.1	Temps de calcul par méthode . . . . .	64
3.2	Paramètres de simulation . . . . .	73
3.3	Oscillations relatives du flux au cours de l'irradiation . . . . .	77
4.1	Caractéristiques détaillées des codes . . . . .	86
4.2	Composition des cellules . . . . .	87
4.3	Paramètres de simulation . . . . .	89
4.4	Paramètres de simulation du cœur . . . . .	94
4.5	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage (HFP) . . . . .	99
4.6	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon (HFP) . . . . .	99
4.7	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage et du coefficient multiplicateur (Calcul 2D) . . . . .	102
4.8	Comparaison des paramètres de simulation MCNP . . . . .	102
4.9	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance (HZP) . . . . .	103
5.1	Fractions des neutrons retardés pour quelques noyaux fissiles . . . . .	108
5.2	Caractéristiques des neutrons retardés pour l' $^{235}\text{U}$ (cas d'une fission ther- mique) . . . . .	108
5.3	Calcul de la fraction de neutrons retardés . . . . .	110
5.4	Constantes neutroniques pour la résolution des équations de cinétique . . .	114
B.1	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage (HFP) . . . . .	126
B.2	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon (HFP) . . . . .	126
B.3	Températures moyennes du combustible par assemblage (K) . . . . .	127
B.4	Températures maximales du combustible par assemblage (K) . . . . .	127
B.5	Températures moyennes du caloporteur par assemblage (K) . . . . .	128



B.6	Densités moyennes du caloporteur par assemblage ( $kg/m^3$ ) . . . . .	128
B.7	Températures du caloporteur en sortie par assemblage (K) . . . . .	128
B.8	Densités du caloporteur en sortie par assemblage ( $kg/m^3$ ) . . . . .	128
C.1	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage et du coefficient multiplicateur (calcul 2D) . . . . .	130
C.2	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon à températures fixées (calcul 2D) . . . . .	130
D.1	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance (HZP) . . . . .	132
D.2	Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon (HZP) . . . . .	133
E.1	Constantes de décroissance des précurseurs par groupe (indépendants des isotopes) . . . . .	135
E.2	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{233}U$ . . .	136
E.3	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{235}U$ . . .	136
E.4	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{238}U$ . . .	136
E.5	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{232}Th$ . . .	137
E.6	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{239}Pu$ . . .	137
E.7	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{240}Pu$ . . .	137
E.8	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{241}Pu$ . . .	138
E.9	Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{242}Pu$ . . .	138

# Introduction

Ces dernières années, plusieurs pays ont annoncé leur volonté de construire ou de relancer leur parc de centrales nucléaires. Cette décision est motivée par plusieurs facteurs, notamment par l'appauvrissement des ressources fossiles actuellement utilisées pour la production électrique, la nécessité de réduire les émissions de gaz à effet de serre, et la diversification des sources d'énergies qui est censée assurer l'indépendance énergétique. Le rôle des centrales nucléaires dans l'offre énergétique future de ces pays occupera certainement une place privilégiée au côté d'autres sources d'énergie à faible émission de  $CO_2$ .

Les technologies actuelles de réacteurs nucléaires, comme l'EPR (Evolutionary Power Reactor) en France, devraient être déployées massivement et remplacer progressivement le parc actuel vieillissant. Cependant, à l'échelle mondiale et dans le cas d'une utilisation massive de l'énergie nucléaire, le recours à des systèmes innovants semble être incontournable afin :

- d'utiliser au mieux les ressources,
- de minimiser les déchets produits,
- de poursuivre l'amélioration de la sûreté des réacteurs,
- et d'améliorer la résistance à la prolifération.

De nouvelles options doivent en conséquence être étudiées et dans cette optique des coopérations internationales existent afin de mutualiser les efforts nationaux comme le Forum International Génération IV.

Rappelons qu'un seul réacteur nucléaire actuel d'une puissance d'1GW contient environ 15 milliards de curies<sup>1</sup>, soit l'équivalent de la radioactivité naturelle contenue dans tous les océans. Le maintien sous contrôle de cette radioactivité et l'absence de dissémination dans l'environnement sont assurés par différentes barrières matérielles de protection successives sur un schéma de type poupées russes. Chaque nouvelle barrière englobe la précédente, telle une redondance : la première barrière de protection est la gaine entourant le matériau combustible. La seconde est la cuve contenant le cœur du réacteur, et la dernière sont les 90 cm de béton lourd précontraint en double enceinte qui assurent le confinement ultime.

La sûreté d'un réacteur, qui est une des principales préoccupations des ingénieurs pour les futures générations de réacteurs nucléaires, est en premier lieu assurée par la chute des barres de sécurité, qui ont la charge de stopper la réaction en chaîne<sup>2</sup>. La conséquence

---

<sup>1</sup> 1 Ci =  $3.71 \cdot 10^{10}$  Bq.

<sup>2</sup> Lors d'une fission nucléaire, un neutron provoque la scission d'un noyau fissile. Cette réaction est

instantanée sera une baisse de la puissance du réacteur à quelques pourcent de sa puissance nominale. La sûreté d'un réacteur passe aussi par une multitude de mécanismes et procédures automatisés, comme l'injection de sécurité en eau borée<sup>3</sup>, ou l'aspersion de l'enceinte assurant un refroidissement auxiliaire.

Mais la sûreté des réacteurs nucléaires c'est surtout une "philosophie" qui repose sur la recherche incessante du meilleur dans la conception des réacteurs. Elle s'appuie sur les erreurs passées (Three Miles Island, Tchernobyl) afin de corriger ce qui doit l'être (procédures de sécurité, qualité du matériel, ...), et d'accroître la redondance et l'indépendance des systèmes de sécurité les plus vulnérables. Cette démarche est empirique, mais pas seulement. Le recours aux techniques de simulation informatique a également permis des avancées majeures car il permet de vérifier chaque cas probable d'incident ou d'accident en réacteur sans crainte de contamination.

De plus, la sûreté d'un réacteur n'est pas qu'une affaire de sûreté dite active (chute des barres, insertion d'eau borée, ...), mais également une sécurité dite passive. C'est le design même du réacteur et sa technologie qui assurent une sûreté intrinsèque; en effet, suivant les perturbations du système, le réacteur peut s'auto-réguler sans intervention humaine ou mécanique. Par exemple, dans le cas d'un réacteur à eau sous pression du parc nucléaire français, toute augmentation de la puissance qui entraîne bien évidemment une augmentation des températures, a pour conséquence immédiate un "ralentissement" de la réaction en chaîne et donc une diminution de puissance. Ce phénomène peut paraître paradoxal, et pourtant il en est ainsi. C'est grâce aux propriétés des combustibles utilisés, à la nature du caloporteur employée et au design même du réacteur que celui-ci présente une sûreté passive. Mais pour vérifier la réponse à ce type de perturbation, le calcul des températures dans les conditions nominales (statiques) et dynamiques (incidentelles) est nécessaire. Le lien qui existe entre la réaction en chaîne (responsable de la puissance dégagée par le réacteur) et les températures des différentes structures est très fort. La prise en compte de leurs interactions, par le biais de simulations couplées entre les deux disciplines physiques les gouvernant, permet de s'assurer par exemple de l'intégrité des structures dans toutes les conditions possibles. En effet une température trop élevée conduirait à la rupture de la première barrière de confinement (les gaines) et donc à une contamination du circuit de refroidissement.

C'est pourquoi, les études de conception, d'exploitation et de sûreté des réacteurs nucléaires nécessitent une utilisation accrue de codes de simulation. Suivant le but recherché, rapidité d'obtention des résultats, investigations sur le potentiel d'une filière, optimisation d'exploitation, analyses de sûreté, ..., certains codes sont plus adaptés que d'autres car chacun d'eux possède ses propres atouts et points faibles. Par exemple, pour les études de neutronique, les codes déterministes de diffusion seront préférentiellement employés pour l'obtention rapide de résultats, alors que les codes de transport, généralement plus lents

---

productrice de nouveaux neutrons qui, à leur tour, vont provoquer d'autres fissions.

<sup>3</sup>Eau contenant un poison (le Bore) qui capture les neutrons et participe à l'arrêt de la réaction en chaîne.

mais plus précis, seront utilisés à des fins différentes et dont les impératifs de temps sont moins contraignants.

Contrairement aux exploitants, au sein du CNRS les contraintes temporelles sont plus flexibles. Les résultats d'une simulation numérique sur le comportement d'un réacteur n'ont pas pour objectif d'aider à la prise de décision sur les actions à tenter dans l'urgence, mais plutôt comme axes de possibilités pour de futures mises en application industrielle. Plus précisément, au sein du groupe PACS (Physique de l'Aval du Cycle et de la Spallation) de l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay, les recherches en matière de réacteurs nucléaires portent sur les options futures, de génération IV ou sur des systèmes actuels utilisant des combustibles innovants.

C'est une des raisons qui a poussé le groupe à utiliser, à l'origine, des codes 3D de transport pour les simulations neutroniques. La volonté d'explorer les options nouvelles a-t-elle motivé le choix des codes Monte Carlo, dits de référence car très peu nécessaires en retour d'expérience. Dans l'optique de réaliser des études sur les réacteurs nucléaires au sein du CNRS, le code MURE[1, 2] (MCNP Utility for Reactor Evolution) a été créé et son développement se poursuit encore aujourd'hui (il représente environ 10 hommes-an). Son but initial était la capacité de réaliser des études en évolution combustible à partir de résultats de taux de réactions calculés par un code Monte Carlo (ici MCNP[3]). Ainsi, MURE contrôle et gère les entrées-sorties de MCNP, réalisant les calculs adéquats qui permettent par la suite au code MURE de résoudre l'équation de Bateman<sup>4</sup>. De nouveaux concepts de réacteurs ont ainsi pu être simulés et leur économie en combustible par rapport à d'autres filières a été quantifiée. Les explorations de nouveaux scénarios de transition ont eux aussi été initiés.

Cependant, ces nouveaux concepts peuvent s'éloigner des designs existants, ce qui soulève la question : sont-ils réalistes ? Par exemple, la puissance linéique d'un nouveau concept est-elle en deçà des capacités thermiques maximales d'extraction de la chaleur par le caloporteur ? Ce concept satisfait-il, au moins grossièrement, aux exigences de sûreté ? Toutes ces questions ne sont pas un facteur limitant aux investigations sur de nouveaux concepts de réacteurs, mais devront être sérieusement étudiées.

C'est dans ce contexte que ce travail de thèse s'inscrit : enrichir le code MURE avec des outils automatisés de couplage neutronique thermohydraulique et réfléchir à des moyens simples de mise en oeuvre de scénarios d'accidents. La priorité était de réaliser un couplage générique assisté, permettant de gérer automatiquement les maillages, la communication entre les codes, et toutes les nécessités liées au couplage, de façon transparente pour l'utilisateur<sup>5</sup>. En effet, les utilisateurs de ces outils sont principalement des neutroniciens qui n'ont pas forcément des connaissances approfondies des codes de thermohydraulique et surtout n'ont pas suffisamment de temps pour réaliser ce type d'études. Ainsi les simu-

---

<sup>4</sup>L'équation de Bateman décrit l'évolution isotopique des milieux radioactifs soumis au flux de neutrons.

<sup>5</sup>La réalisation de ce couplage permet un usage convivial, mais bien entendu, l'utilisateur peut avoir le contrôle sur toutes les étapes et options.

lations couplées neutronique thermohydraulique avec le code MURE par rapport à des études neutroniques seules :

- ne requièrent pas de compétences supplémentaires,
- les jeux de données d’entrée sont similaires, voire simplifiés (seule une description de la géométrie est nécessaire),
- sont compatibles avec la majorité des outils de MURE (scénarios d’évolution couplés à la thermohydraulique, post-traitement graphique, ...),
- et sont évolutifs (l’ajout de nouveaux codes “se limite” à la transcription des fichiers d’entrée et de relecture des fichiers de sortie).

Ce mémoire présentera les méthodologies employées pour le couplage 3D avec utilisation du code MURE en supervision. Une étude comparative (benchmark) sur un cœur de réacteur à eau sous pression à composition et enrichissement très hétérogène a été réalisée afin de valider le couplage dans un cas très complexe.

# Chapitre 1

## Introduction aux problématiques du couplage 3D

Les études de sûreté pour les designs innovants de réacteurs nucléaires, comme les concepts de génération IV, requièrent des modélisations en trois dimensions afin d'assurer une description aussi réaliste que possible. De plus, si la simulation de phénomènes locaux (DNBR<sup>1</sup>, facteurs de forme, courants transverses, ...) est nécessaire, alors un couplage 3D neutronique/thermohydraulique devient incontournable. Dans ce cas, des itérations successives entre la neutronique et la thermohydraulique sont réalisées jusqu'à la convergence numérique; selon la finesse du maillage et/ou la technologie du réacteur, la simulation nécessite de quelques itérations à un peu plus d'une dizaine.

### 1.1 Rappels sur le principe de fonctionnement d'un réacteur nucléaire

Un réacteur nucléaire est un milieu producteur d'énergie issue de la fission des noyaux. Il est généralement composé de noyaux lourds susceptibles de fissionner après capture neutronique (le combustible) et d'un fluide caloporteur permettant l'évacuation de la chaleur produite. Dans la majorité des réacteurs actuels, le caloporteur joue aussi le rôle de modérateur. Celui-ci est composé de noyaux légers capables de ralentir les neutrons incidents par chocs successifs. Le cœur est composé d'une centaine d'assemblages de matériaux devant supporter les températures importantes et résister aux dégâts causés par l'irradiation. Mais un réacteur nucléaire c'est surtout une machine thermique électrogène, transformant l'énergie de fission en énergie thermique, qui évacuée par le circuit primaire de refroidissement, produira de la vapeur dans la boucle secondaire. Cette vapeur est ensuite utilisée afin de produire de l'électricité par l'intermédiaire d'une turbine (cf. figure 1.1).

Il existe différentes filières de réacteur pouvant utiliser différents :

---

<sup>1</sup>Departure from Nucleate Boiling Ratio - Au delà de ce point on risque l'assèchement de la paroi et donc une crise d'ébullition.

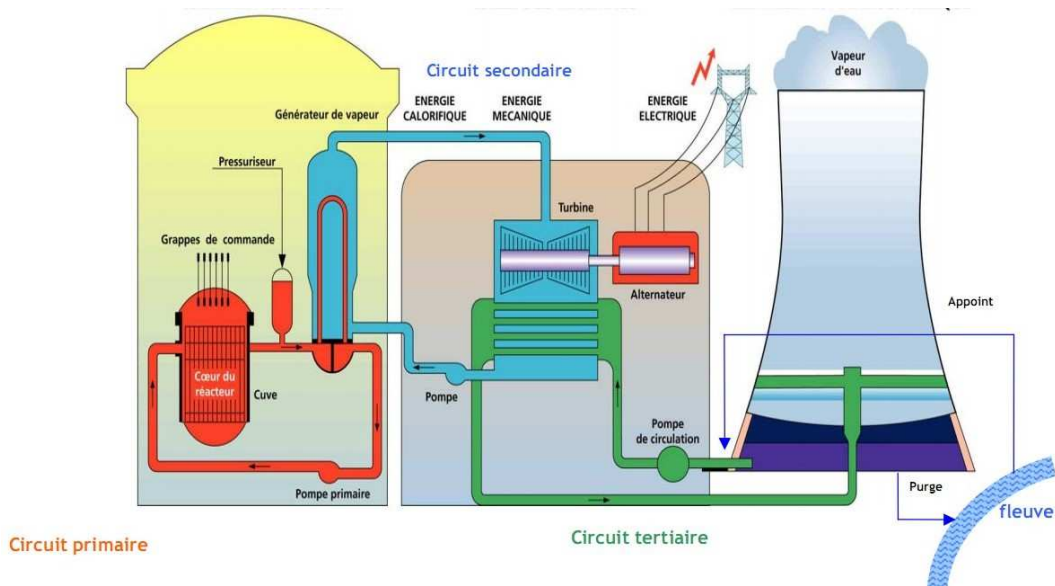


FIG. 1.1: Schéma de principe d'une centrale nucléaire à eau sous pression

- isotopes fissiles ( $^{233}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ) et fertiles ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{232}\text{Th}$ ),
- domaines énergétiques des neutrons (rapide, épithermique, thermique),
- modérateurs (eau légère, eau lourde, graphite),
- et caloporteurs (eau légère, eau lourde, sodium liquide, plomb liquide, sels fondus, hélium, dioxyde de carbone, ...).

Ainsi, le panel des réacteurs imaginables est très important, mais seule une fraction de ces filières est exploitée (ou l'a été). D'autres filières pourraient également l'être dans un futur proche. Ce sont sur ces quelques concepts que portent les études de simulation (cf. tableau 1.1).

Mais un réacteur nucléaire, c'est aussi une source de noyaux radioactifs à durées de vie et activités variées dont il faut gérer l'inventaire une fois le réacteur arrivé en fin de vie. Cet aspect fait aussi partie intégrante des choix de filières futures, afin de minimiser ces inventaires ou d'imaginer des parcs mixtes faisant intervenir différents types de filières dont certaines auraient la charge d'incinérer une partie de ces inventaires.

Le CNRS, de part sa place au sein de la recherche française, n'a pas vocation de fournir à l'industrie un prototype de réacteur, mais plutôt d'explorer toutes les voies qui lui semble opportunes. Cet aspect est à garder en mémoire, car il est déterminant en ce qui concerne le choix des codes mis en oeuvre.

## 1.2 Historique

Les simulations de réacteur nucléaire utilisent principalement deux types de codes :

- ceux modélisant le transport des neutrons et la réaction en chaîne : codes de neutronique

Type de réacteur	Domaine énergétique	Noyau fissile	Noyau fertile	Caloporteur	Modérateur	Nom
Graphite-gaz	thermique	$^{235}\text{U}$	$^{238}\text{U}$	$\text{CO}_2$	<i>graphite</i>	UNGG, Magnox
Eau légère	thermique	$^{235}\text{U}$	$^{238}\text{U}$	$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_2\text{O}$	PWR, BWR
Eau lourde	thermique	$^{235}\text{U}$	$^{238}\text{U}$	$\text{D}_2\text{O}$	$\text{D}_2\text{O}$	HWR
Haute température	thermique	$^{235}\text{U}$ ou $^{233}\text{U}$	$^{238}\text{U}$ ou $^{232}\text{Th}$	$\text{He}$	<i>graphite</i>	HTR
Neutrons rapides	rapide	$^{239}\text{Pu}$	$^{238}\text{U}$	<i>sodium</i>	aucun	LMFBR
Sels fondus	thermique ou rapide	$^{235}\text{U}$ , $^{233}\text{U}$ , $^{239}\text{Pu}$	$^{238}\text{U}$ ou $^{232}\text{Th}$	<i>Sels fondus</i>	<i>graphite</i> ou aucun	MSR

TAB. 1.1: Exemples de quelques filières de réacteurs nucléaires

- ceux modélisant la dégradation de l'énergie de fission en chaleur et les transferts thermiques associés : codes de thermohydraulique.

Ces deux familles de codes représentent une grande partie des travaux de simulation ; bien entendu, les codes dits de système (modélisant les échangeurs de chaleurs, les générateurs de vapeur, les boucles secondaires et tertiaires, ...), les codes de thermomécanique et bien d'autres ont aussi leur importance afin de représenter au mieux la physique et d'explorer les scénarios d'incidents ou d'accidents dans leur intégralité. Un couplage ultime concentrerait ainsi les codes cœur et les codes systèmes, et serait capable de simuler n'importe quel incident d'une centrale nucléaire. Cependant de tels couplages sont extrêmement lourds à mettre en oeuvre et un des moyens les plus évidents de s'en approcher serait de le réaliser brique par brique, surtout si le but est d'obtenir un package générique (non lié à une certaine géométrie/technologie). Le couplage présenté ci-après en représenterait alors la première étape, peut être l'une des plus délicates car soumises à des contraintes importantes, tant physique qu'informatique.

La neutronique et la thermohydraulique ont été développées et sont encore souvent traitées aujourd'hui de façon indépendante. Historiquement, cela se comprend bien compte tenu des moyens informatiques limités et le manque de précision sur les bases de données<sup>2</sup> (essentiellement les données nucléaires) qui donnaient peu de justification alors, à une forte

<sup>2</sup>Les noyaux prépondérants comme l' $^{235}\text{U}$  ou le  $^{239}\text{Pu}$  sont depuis longtemps très bien connus, mais certains actinides ou autres noyaux n'ont pas fait l'objet d'expériences de mesures aussi approfondies jusqu'à récemment.



interconnexion entre ces deux disciplines. En effet, l'intérêt d'un couplage neutronique thermohydraulique est une meilleure représentation de la réalité, mais si le raffinement sur les résultats qu'est censé apporter le couplage est noyé dans les barres d'erreur des codes, alors le couplage n'est pas justifié.

L'avènement de l'ère informatique, l'amélioration des techniques de mesures pour les données nucléaires, ainsi que la volonté industrielle et politique d'augmenter les rendements et la sûreté des réacteurs nucléaires ont changé la donne. Nombre d'instituts de recherche ou d'industriels intensifient massivement depuis quelques années l'élaboration ou le perfectionnement de codes 3D couplés.

Au niveau industriel, la complexification des chargements combustibles en cœur avec recours au MOX (Mixed OXide), l'utilisation de poisons consommables, l'augmentation de l'hétérogénéité des enrichissements et du taux de combustion (burn-up) font appel à des techniques de simulations bien plus sophistiquées que celles employées par le passé, et ont été rendues possibles en partie grâce aux simulations 3D avec couplage thermohydraulique (a minima pour le cœur du réacteur). En effet ces méthodes et techniques sont indispensables à la démonstration de la sécurité des installations auprès des autorités de sûreté, et de la viabilité économique auprès des exploitants.

Ainsi, le couplage réalisé pourrait avoir deux types d'application bien distinctes :

- La première est une utilisation par les instituts de recherche : exploration des systèmes innovants possibles,
- la seconde pourrait être industrielle : utilisation de ce code pour des études de recherche et développement en matière d'amélioration de rendement et d'optimisation.

### 1.3 Méthodologie générale

Un code de simulation consiste à étudier des phénomènes physiques par la résolution numérique des équations les régissant (comme le transport et les interactions des neutrons dans la matière ou le mouvement d'un fluide et ses effets). En fonction des approximations choisies, qui résultent d'un compromis entre précision des résultats et rapidité d'exécution, les équations résolues peuvent être par exemple : l'équation de Boltzmann en transport ou en diffusion pour la neutronique, et les équations de Naviers-Stokes ou d'Euler pour la mécanique des fluides. Dans tous les cas, la résolution de ces équations utilise un schéma numérique afin de substituer les formulations différentielles par des approximations des opérateurs sur chaque point du maillage.

Cet aspect est la première difficulté d'un couplage entre codes de neutronique et de thermohydraulique. En effet, les méthodes de résolution des équations<sup>3</sup> décrivant les phénomènes physiques considérés peuvent être différentes et font donc appel à des maillages peu recouvrables entre eux, même si la géométrie simulée dans l'absolu est strictement

<sup>3</sup>Méthode des différences finies, méthode des éléments finis, méthode des volumes finis, méthode des caractéristiques, ...

identique. Certains codes, comme les codes de CFD (Computational Fluid Dynamics) peuvent faire appel à des mailleurs externes : un programme indépendant, qui va se charger de générer un maillage. Celui ci sera ensuite réutilisé par le code de CFD (ex : Saturne[4]) comme donnée d’entrée géométrique.

Dans ce travail de thèse, le code de thermohydraulique utilisé ne requiert pas de mailleur. La description de la géométrie se fait au sein même du fichier d’entrée<sup>4</sup> du code et suivant une convention contraignante. Il en est de même pour le code de neutronique, mais dans notre cas, c’est un code Monte Carlo ; il ne résout donc pas des équations différentielles. Aucun maillage n’est nécessaire : l’espace et le temps ne sont pas discrétisés. Par contre, la géométrie se compose de plusieurs “cellules” correspondant aux différents éléments constituant le système (crayon combustible, gaine, cuve, ...)

Etant donné le caractère répétitif de la géométrie d’un réacteur (crayons dans un assemblage, assemblages dans un cœur), il est d’usage d’utiliser des réseaux pour la construction de cette géométrie. Nous serons amenés à définir des mailles élémentaires et nous parlerons de “maillage” ; cela se référera donc à la définition des réseaux qui est étroitement liée à la discrétisation spatiale du milieu.

Souvent pour une même géométrie, les mailles neutronique et thermohydraulique sont différentes (cf. figure 1.2).

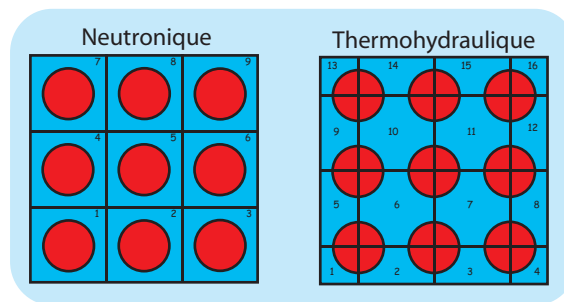


FIG. 1.2: Exemple de réseaux utilisés en neutronique et thermohydraulique pour une même géométrie

### 1.3.1 Recouvrement des maillages

La neutronique permet d’avoir accès aux dépôts de puissance dans le crayon combustible. Quant à la thermohydraulique, elle calcule la dégradation de l’énergie de fission en chaleur et sa dispersion dans le crayon, ainsi que les transferts thermiques dans le fluide caloporteur qui peuvent, de par leurs disparités, être source de courants transverses. La méthode de résolution du code utilisé est ce qu’on appelle un schéma sous-canal (espace élémentaire compris entre les crayons combustible). En conséquence, un sous-canal sera

<sup>4</sup>Le ou les fichiers d’entrée d’un code se présentent comme un fichier de texte, écrit dans un langage propre au code en question, et sont relus lors de l’exécution. L’écriture de ce type de fichier peut s’avérer être très laborieuse.

chauffé par plusieurs crayons qui ne possèdent pas, a priori, les mêmes caractéristiques de puissance.

Ainsi deux jeux de données d'entrée différents seront nécessaires : un pour le code de neutronique et l'autre pour le code de thermohydraulique. Tout d'abord parce que les langages propres à chaque code sont différents, mais également car les mailles élémentaires utilisées en neutronique et en thermohydraulique le sont aussi. Afin de simplifier au maximum l'utilisation de ce couplage, des classes génériques ont été mises au point dans MURE afin d'assurer une fluidité et une efficacité d'utilisation. En effet, MURE ne nécessite qu'une description de la géométrie. Les fichiers d'entrée pour les différents codes sont automatiquement générés grâce aux méthodes des classes définies. Le découpage en trois dimensions, indispensable au couplage, est lui aussi géré par MURE. Celui-ci est nécessaire car il autorise la prise en compte des gradients de température, autant dans le combustible que dans le caloporteur ou les structures (cf. figure 1.3).

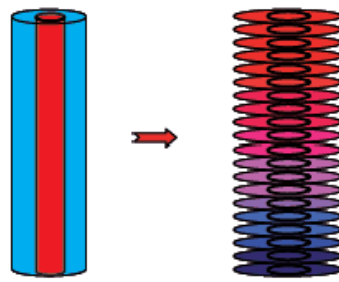
Les codes couleurs représentent des zones dans lesquelles les grandeurs physiques sont moyennées, c'est-à-dire que du point de vue neutronique par exemple, pour chaque crayon d'une même zone, le même flux moyen sera utilisé. Ce regroupement peut s'avérer nécessaire suivant la complexité de la géométrie simulée ou suivant le degré de raffinement souhaité. Bien évidemment, il est possible de faire une simulation crayon par crayon, sans les regrouper par zone. Mais la finesse du maillage dépend d'un compromis entre le temps de calcul et la nécessité de détail des résultats.

### 1.3.2 Dépendance des sections efficaces en fonction de la température

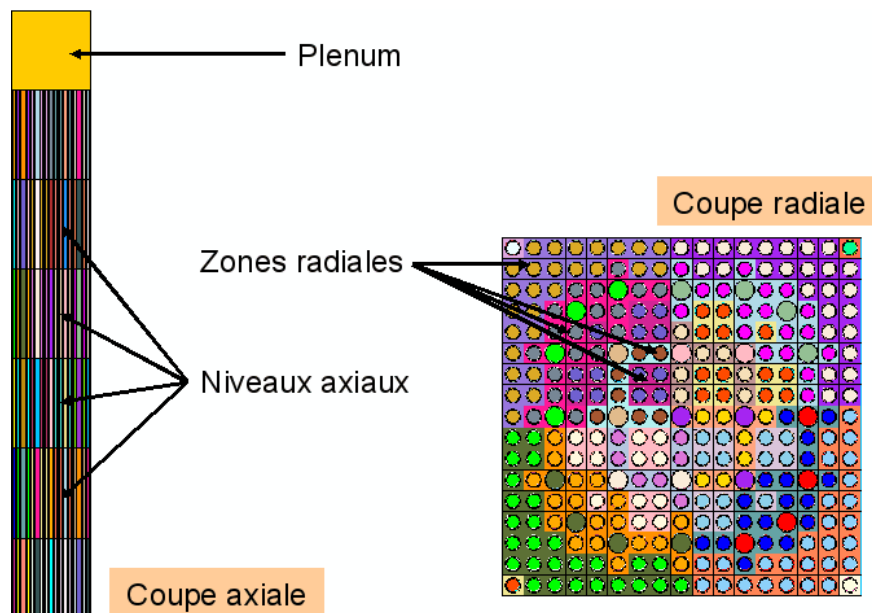
De par un découpage géométrique (comme celui présenté dans la figure 1.3), l'accès à des résultats locaux est possible. Mais disposer de gradients de température et profils de flux nécessitent en contre partie des données brutes fonction de la température (sections efficaces, conductivité thermique, chaleur massique, ...) pour maintenir une cohérence (cf. figure 1.4[5]). Pour ne parler que des sections efficaces, une interpolation fine en température permet la prise en compte de l'effet Doppler. L'importance de cet effet dépend de l'isotope en question et décrit une contre-réaction liée à l'augmentation ou la diminution de la température. Par exemple, lorsque la température augmente, les résonances s'élargissent (cf. figure 1.5[5]), ce qui peut suivant l'isotope, augmenter les captures stériles de neutrons et de ce fait, modifier les taux de réactions de fission. L'effet immédiat sera une diminution de la puissance et donc de la température. Cet aspect de neutronique contribue à la sûreté intrinsèque des réacteurs nucléaires et doit être correctement simulé.

### 1.3.3 Méthode de couplage

Une des premières applications d'un couplage neutronique thermohydraulique du cœur d'un réacteur est la détermination des conditions locales à puissance nominale : c'est-à-dire une représentation en trois dimensions de toutes les caractéristiques du cœur du réacteur.



(a) Discretisation axiale pour la prise en compte des gradients de température



(b) Exemple de découpage d'un assemblage

FIG. 1.3: Découpage radial et axial

Mais pour atteindre cette représentation, il faut réaliser des itérations successives<sup>5</sup> entre les calculs de neutronique et les calculs de thermohydraulique (cf. figure 1.6). Chaque modification apportée par l'un des codes aura une influence sur les résultats de l'autre (par exemple l'influence de la température sur les sections efficaces et les densités). Cette étape est appelée : recherche de la convergence. En effet, les résultats au cours des itérations successives présenteront des écarts sur les résultats de moins en moins grands par rapport au calcul précédent, et qui encadrent la valeur finale, dite convergée.

Différentes méthodes de couplage existent, chacune possédant ses propres avantages et inconvénients. Dans notre cas, un couplage dit "externe" a été retenu (cf. figure 1.7). Il

<sup>5</sup>En effet, le premier calcul est rarement réaliste, puisque la carte 3D des températures ou le profil flux ne sont pas connus. C'est justement le but d'un calcul couplé.

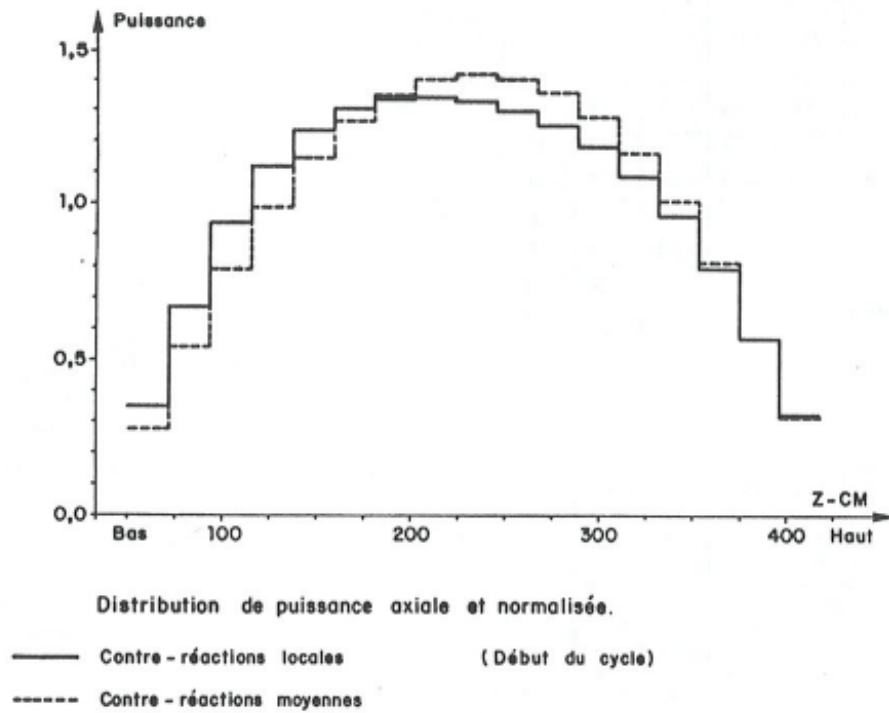


FIG. 1.4: Distribution de puissance axiale - intérêt de la prise en compte des sections efficaces dépendantes en température

présente l'avantage de ne pas avoir à modifier les codes utilisés ; ils sont couplés directement au travers d'échanges de données. Cela implique néanmoins quelques contraintes à gérer comme le recouvrement des maillages et la correspondance entre structures à conserver pour la projection des grandeurs physiques nécessaires (cf. figure 1.8). Les données échangées, comme présentées dans la figure 1.7, sont pour chaque noeud de la maille tridimensionnelle :

- les dépôts de puissance dans chaque crayon ( $q$ ) (cf. figure 1.8),
- les températures des structures ( $T_F$  pour le combustible,  $T_S$  pour la gaine,  $T_C$  pour le caloporteur),
- les densités du caloporteur ( $\rho_c$ ),
- la concentration de bore dans le caloporteur ( $c_B$ ).

## 1.4 Grandeurs physiques recherchées et codes associés

Que ce soit pour les besoins du couplage ou non, les principales grandeurs physiques que l'on cherche à déterminer sont :

- la distribution du flux de neutrons
- la distribution de puissance (et donc les facteurs de forme)
- les constantes cinétiques (fraction de neutrons retardés, temps de génération, ...)

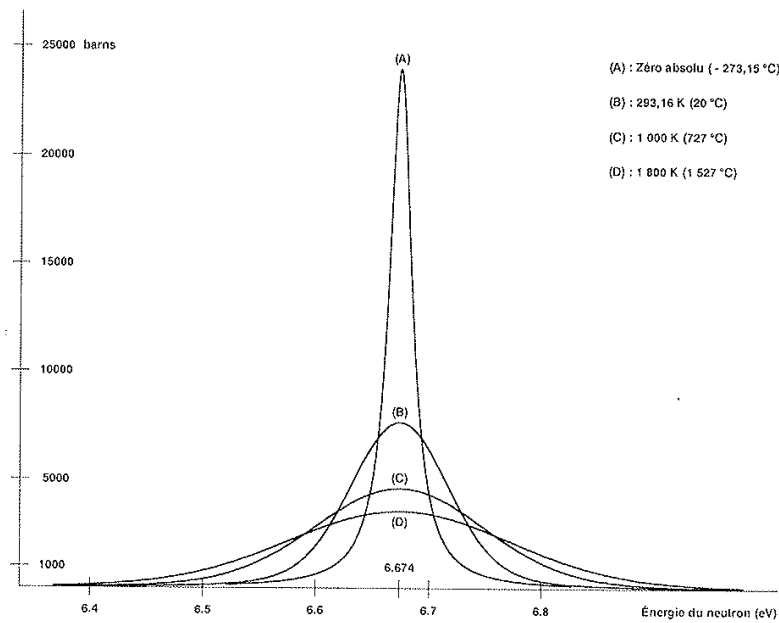


FIG. 1.5: Élargissement par effet Doppler d'une résonance de l'uranium 238



FIG. 1.6: Itérations neutronique / thermohydraulique jusqu'à convergence

- la réactivité
- les points chauds du réacteur
- Minimum DNBR<sup>6</sup> (pour la crise d'ébullition).

D'autres grandeurs peuvent aussi être utiles comme :

- le dommage aux structures (Déplacement Par Atome)
- la production des gaz de fission (qui altère par exemple les coefficients de conductivité thermique)
- les bilans de matière tridimensionnels
- la dépendance au cours du temps des différentes grandeurs

Les codes de calcul permettant l'accès à ces informations sont nombreux. Pour la partie neutronique deux grandes familles de codes se distinguent : les codes déterministes<sup>7</sup> et les codes probabilistes. Les codes déterministes sont très performants pour le calcul de l'ensemble des grandeurs présentées ci-dessus et sont adaptés aux couplages multi-disciplinaires. Cependant des difficultés peuvent apparaître lors de simulations de géométrie complexe, et

<sup>6</sup>Departure from Nucleate Boiling Ratio

<sup>7</sup>Résolution analytique des équations régissant le parcours des neutrons et leurs interactions avec la matière

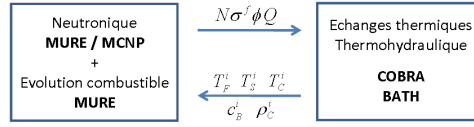


FIG. 1.7: Communication des données en couplage externe

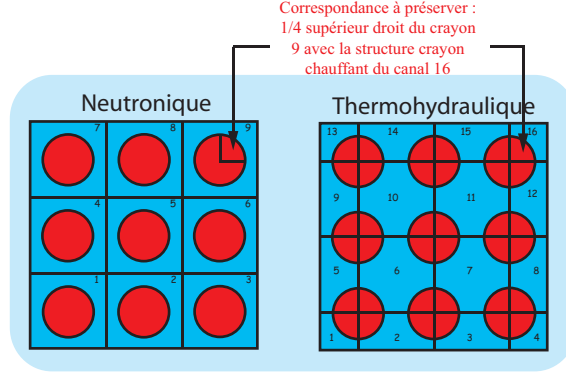


FIG. 1.8: Correspondance des crayons (géométrie neutronique) avec les structures de COBRA (géométrie thermohydraulique)

leurs résultats ont quelques fois besoin d'être recalés sur des calculs Monte Carlo (calculs dits "étalons", de référence). Les codes probabilistes sont globalement mieux à même de simuler des géométries complexes à haut gradient d'hétérogénéité, mais les temps de calculs sont souvent prohibitifs. Cependant, de par l'augmentation croissante de la puissance de calcul des ordinateurs, et de par la possibilité de paralléliser les calculs, dans un proche avenir, ce type de codes pourra être un outil compétitif devant les codes déterministes. Ces deux familles de codes sont donc actuellement complémentaires. Mais, comme spécifié dans l'introduction, les codes Monte Carlo de façon générale, et MCNP en particulier, sont parfaitement adaptés à nos besoins de simulation, notamment car ils ne sont pas dépendants d'une technologie<sup>8</sup>. C'est pourquoi, pour la partie neutronique, nous avons retenu le code de transport Monte Carlo MCNP, qui est l'une des références dans ce domaine et qui est disponible soit à la NEA<sup>9</sup>, soit au RSICC<sup>10</sup>.

En ce qui concerne la partie thermohydraulique, le premier critère de choix a été la disponibilité. Afin d'être cohérent avec cet aspect de diffusion des outils de simulation, le choix du code de thermohydraulique était restreint au fait qu'il soit lui aussi disponible pour la communauté. Les autres principaux critères auxquels devait satisfaire le code,

<sup>8</sup>Souvent, les codes déterministes ont été développés et optimisés en vue d'une utilisation précise : un certain type de réacteur avec un caloporteur/modérateur typique et le domaine énergétique du flux qui lui est associé. Les méthodes de résolution des équations de transport ou de diffusion sont choisies avec anticipation sur les résultats. Cela signifie que certains codes développés pour des spectres thermiques par exemple, ne seront pas forcément adaptés à la simulation en spectre rapide.

<sup>9</sup>Nuclear Energy Agency.

<sup>10</sup>Radiation Safety Information Computational Center.

étaient sa capacité à réaliser des calculs 3D et à simuler des écoulements diphasiques. Le code COBRA a donc été retenu pour la partie thermohydraulique dans le package MURE. Notons qu'il existe différentes versions qui peuvent être aisément utilisées (certaines sont d'ailleurs open-source ainsi que validées et qualifiées).





## Chapitre 2

# Description des codes de simulation utilisés

Les études de sûreté ou d'investigation de nouveaux designs requièrent une analyse complète du réacteur incluant le cœur du réacteur avec son circuit primaire, mais aussi les échangeurs de chaleur et les circuits annexes. Ce type de simulation fait appel à plusieurs disciplines physiques.

Pour la partie qui est traitée dans ce travail de thèse, seule la partie sous flux est simulée. Les deux principales disciplines qui interviennent dans ce cadre de simulation sont la neutronique et la thermohydraulique. Pour des raisons déjà évoquées, elles sont indissociables l'une de l'autre. Les résultats de simulation sont subordonnés à leur interdépendance. Le couplage mis en jeu est un couplage dit externe, ce qui veut dire que les simulations neutronique et thermohydraulique se font séparément. L'influence d'une discipline sur l'autre se manifeste au niveau des jeux de données d'entrées des codes.

### 2.1 Calculs de neutronique

#### 2.1.1 Introduction

Pour les études de conception, la simulation neutronique est utilisée comme base de détermination de la structure géométrique du cœur de la centrale nucléaire. A partir de la géométrie du cœur et la composition de la matière le constituant, le code de neutronique pourra fournir les deux paramètres les plus importants pour la conception :

- le facteur de multiplication neutronique (noté  $k$ , il représente le rapport du nombre de fissions aux générations successives),
- la distribution de puissance (représente la répartition des fissions dans l'espace).

Ceux-ci sont conditionnés par les choix retenus sur la disposition dans l'espace des différentes structures, sur la masse de combustible et son vecteur isotopique, et sur la présence d'un modérateur impactant l'énergie des neutrons.

### 2.1.2 Logiciels disponibles

Le flux de neutrons dans le cœur peut être modélisé par deux types de codes :

- les codes déterministes (en diffusion ou en transport)
- et les codes Monte Carlo.

Ils représentent deux approches distinctes de la résolution des équations décrivant un phénomène physique (voir ci-dessous : équation de Boltzmann) : méthodes déterministes et probabilistes. Dans notre cadre d'étude, l'approche déterministe consiste en la résolution de l'équation de transport ou de l'équation de diffusion par des méthodes de discrétisation de l'espace, du temps et des énergies. Concernant l'énergie, les sections efficaces, flux, taux de réactions, ..., sont mises en groupe d'énergie<sup>1</sup> afin de faciliter la résolution des équations (résolution de l'équation groupe par groupe). La discrétisation spatiale entraîne la discrétisation temporelle; elle dépend du type d'équation résolue et de la méthode employée.

#### Equation de Boltzmann

L'évolution de la population neutronique au sein de cette géométrie est gouvernée par l'équation de Boltzmann. Elle établit un bilan entre les gains et les pertes des neutrons par unité de temps et de volume :

$$\frac{\partial N(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} = \frac{\text{gain} - \text{perte}}{\text{unité de temps et de volume}} \quad (2.1)$$

avec  $\vec{r}$  le vecteur position,

$v$  la vitesse,

$\vec{\Omega}$  l'angle solide et

$t$  le temps.

La population de neutrons est plus souvent décrite par le flux, qui représente une masse volumique neutronique :

$$\frac{1}{v} \Phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \quad (2.2)$$

exprimée en  $\text{neutrons.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ .

Ainsi, l'équation de Boltzmann peut être dérivée en considérant, dans un volume arbitraire, le bilan des gains et pertes de neutrons :

---

<sup>1</sup>Bin énergétique

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} = & - \operatorname{div}(\vec{\Omega} \cdot \Phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)) \\
& - \Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \\
& + \int_{4\pi} \int_0^\infty \left[ \Sigma_s(\vec{r}, v' \rightarrow v, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, t) \Phi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) \right] dv' d\vec{\Omega}' \\
& + S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Cette équation contient à la fois des dérivées en temps et en espace, ainsi que des intégrales sur les angles solides et la vitesse des neutrons : c'est la raison pour laquelle elle est qualifiée d'expression intégral-différentielle de l'équation de Boltzmann.

Les quatre termes de l'équation représentent les quatre façons de modifier la population neutronique dans un volume de contrôle :

- le premier terme correspond au bilan entrée/sortie des neutrons dans le volume (signe négatif : fuites),
- le second représente les absorptions ou les transferts vers d'autres vitesses et/ou vers d'autres directions dont la probabilité est quantifiée au travers de la section efficace totale  $\Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$  (signe négatif : disparition de neutrons),
- le troisième terme est celui des réactions de transferts (section efficace  $\Sigma_s(\vec{r}, v' \rightarrow v, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, t)$ , par ralentissement, upscattering, et/ou changement de direction) représentant les nouveaux neutrons à comptabiliser (d'où le signe positif),
- le dernier terme est celui des sources de neutrons internes (fissions) et externes (signe positif car c'est une production de neutrons).

### Les codes déterministes en diffusion

Exemples : CRONOS[6], ERANOS[7], DONJON[8], SKETCH-INS[9].

Ces codes résolvent l'équation de la diffusion pour déterminer la nappe de puissance. Ils utilisent des sections efficaces macroscopiques générées à quelques groupes énergétiques<sup>2</sup>. La réserve principale à émettre sur les codes de diffusion provient de leur nécessité d'homogénéisation afin de satisfaire aux approximations des équations résolues. Ainsi la géométrie est homogène à l'échelle de l'assemblage ou du cœur. Cette approximation reste valide dans le cas de cœurs de réacteur relativement homogènes en ce qui concerne les matériaux et enrichissements combustible. Mais dans le cas d'une forte hétérogénéité, ces codes peuvent alors montrer leurs limites.

Des couplages avec des codes "système"<sup>3</sup> ont été réalisés pour des simulations d'accident en REP et REB<sup>4</sup>. Ils sont généralement restreints à des géométries simplifiées mais four-

<sup>2</sup>Groupes énergétiques : les sections efficaces continues des bases standards sont transformées en données multi-groupes. Les grandeurs sont alors constantes par groupe énergétique.

<sup>3</sup>Codes de simulations à l'échelle du système : prise en compte des boucles primaires et secondaires, des échangeurs de chaleur, ... Mais la modélisation du cœur est généralement un modèle simplifié.

<sup>4</sup>Réacteur à Eau sous Pression (PWR) et Réacteur à Eau Bouillante (BWR)

nissent des résultats de transitoires satisfaisants. Le programme CRISSUE-S[10, 11, 12] regroupe quelques uns de ces codes couplés pour des simulations en réacteur à technologie de caloporteurs en eau. Citons à titre d'exemple :

- le code de neutronique PARCS[13], créé pour les études de dynamique suite à une perturbation dans le cœur a été couplé à plusieurs codes système de thermohydraulique : TRAC-M[14] et RELAP5[15] (applications : rupture tuyauterie vapeur, incident de turbine) ;
- le code de cinétique DYN3D[16] (diffusion à deux groupes) a été couplé au code système ATHLET[17] et a permis la simulation d'incidents de turbine vapeur.

Dernier point notable sur ces codes : ils nécessitent la construction préalable de sections efficaces auto-protégées (généralement de 2 à 172 groupes d'énergie ou plus) à partir de codes de transport.

### Les codes déterministes en transport

Exemples : APOLLO[18, 19, 20], ECCO[21], DRAGON[22], DORT-TORT[23], DIAMANT[24].

Ce sont des codes dits de transport multi-groupes à 2 ou 3 dimensions ; ils résolvent, dans une géométrie donnée, l'équation de Boltzmann en multi-groupes pour le transport des neutrons. Plusieurs méthodes peuvent être employées, en voici les principales :

- méthode des  $P_{ij}$  : traitement de l'équation de transport sous sa forme intégrale en utilisant le formalisme des probabilités de collision. Cette méthode consiste à calculer les probabilités de première collision du neutron dans chaque direction qui définiront la matrice des  $P_{ij}$ . C'est-à-dire, la probabilité qu'un neutron sortant d'une région  $i$  atteigne la région  $j$ . Le principal attrait de cette méthode est qu'elle peut traiter plusieurs types de géométrie avec des temps de calcul raisonnables.
- méthode  $S_n$  : traitement de l'équation de transport sous sa forme intégral-différentielle en utilisant des méthodes aux ordonnées discrètes. Elle fournit donc une solution angulaire. Elle présente l'avantage de prendre en compte l'anisotropie des chocs et du flux. En contre-partie, cette méthode possède un inconvénient non négligeable : elle ne peut pas traiter tous les types de géométries et notamment les géométries composées. C'est pourquoi une étape de cylindrisation des géométries est souvent nécessaire. Malgré cet aspect, cette méthode est largement utilisée et adaptée aux simulations neutroniques exigeantes. Sa technique de résolution par les ordonnées discrètes permet de traiter avec suffisamment de précision les effets d'anisotropie du flux. Cette discrétisation sur  $4\pi$  consiste à calculer le flux angulaire sur un certain nombre de directions (cf. figure 2.1[5]) que l'on fixe arbitrairement suivant la finesse requise sur les résultats.
- méthode des caractéristiques : calcule les matrices de collisions directionnelles. Pour des maillages non structurés (MOC<sup>5</sup>), cette méthode résout la formulation aux ordonnées discrètes de l'équation de transport en calculant les flux sur des trajectoires.

---

<sup>5</sup>Method Of Characteristics

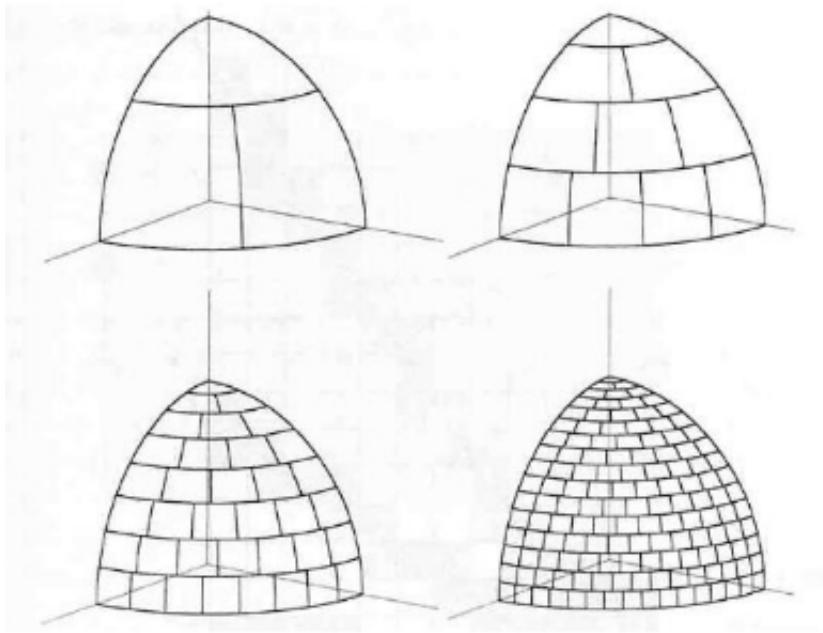


FIG. 2.1: Représentation des maillages  $S_4$ ,  $S_8$ ,  $S_{16}$ , et  $S_{32}$  sur un huitième de sphère

### Les codes Monte Carlo

Exemples : MCNP[3], TRIPOLI[25], VIM[26].

L'approche probabiliste, dite Monte Carlo, ne résout pas une équation comme les codes déterministes. Elle s'appuie sur deux théorèmes fondamentaux : la loi des grands nombres, permettant d'estimer des valeurs moyennes, et le théorème de la limite centrale permettant d'estimer la précision de cette valeur (celui-ci fournit ce qu'on appelle l'intervalle de confiance ou variance statistique). Un code Monte Carlo est fondé sur le tirage aléatoire d'un très grand nombre d'évènements (émission de particules), et s'appuyant sur des probabilités (sections efficaces régissant les interactions entre la particule simulée et la matière traversée), il détermine les probabilités statistiques décrivant le transport des particules. Chaque particule est suivie de sa naissance à sa mort, calculant chaque étape de son transport, i.e. ses interactions avec la matière (captures, diffusion, ..., cf. figure 2.2).

Il existe deux modes de simulation : critique ou à sources de fission. Dans notre cas ce sont des simulations dites critiques : un des intérêts est de vérifier si la réaction en chaîne est auto-entretenu ou non.

Les données de base sur les probabilités d'interaction avec la matière (sections efficaces) utilisées par les codes Monte Carlo sont les mêmes que pour les codes déterministes. A la différence près, qu'ici les données nucléaires peuvent être utilisées "directement". Il n'y a pas d'étape de condensation en énergie ou de correction d'auto-protection. En règle générale, un code probabiliste requiert bien moins d'approximations qu'un code détermin-

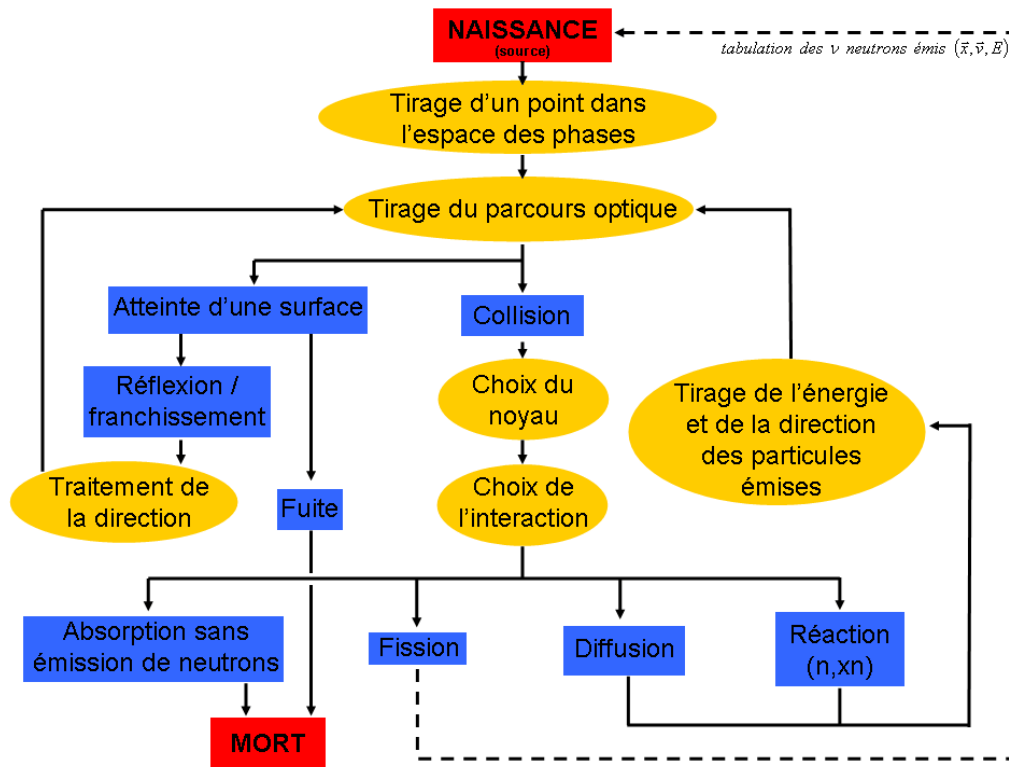


FIG. 2.2: Schéma de traitement de l'équation de transport par l'approche probabiliste en calcul critique (MCNP)

iste (comme la discrétisation ou l'homogénéisation). Ainsi, un code Monte Carlo donne accès à la simulation de géométries plus complexes, mais le coût en temps de calcul n'est pas à négliger. Même si les techniques de parallélisation permettent de diminuer ces temps, pour une géométrie complexe nécessitant une variance statistique faible, les temps de calcul peuvent atteindre une dizaine d'heures.

Les raisons principales du choix d'un code probabiliste pour la partie neutronique du couplage ont été explicitées dans le chapitre précédent. Ce choix est d'autant plus logique que le code de supervision et d'évolution combustible MURE inclut déjà le couplage avec le code Monte Carlo MCNP.

### 2.1.3 Modélisation de la physique mise en jeu

Le code MCNP[3] (Monte Carlo N Particles) est un code largement utilisé par la communauté scientifique en ce qui concerne les codes de transport probabiliste de particules. Il est développé au LANL (Laboratoire National de Los Alamos). En quelques mots, MCNP effectue le transport statique des particules (neutrons<sup>6</sup>, photons, électrons) dans n'importe

<sup>6</sup>MCNP transporte les neutrons à énergie continue

quelle configuration tridimensionnelle, ce qui autorise la simulation de géométries exactes. MCNP permet d'avoir accès aux taux de réaction, flux, coefficient multiplicateur ( $k_{eff}$ ), ..., mais ne prend pas en compte l'évolution du combustible<sup>7</sup>. C'est pourquoi le code MURE a été créé (cf. section 2.3.2).

La première étape lors de son utilisation consiste à décrire fidèlement la géométrie à simuler. Pour cela chaque matériau occupera une forme géométrique donnée. Cette association représente ce que l'on appelle une cellule. Chaque cellule peut être découpée en plusieurs cellules intérieures suivant le degré de précision requis pouvant par exemple mettre en évidence les phénomènes d'effet de peau, ou les taux de combustion sur la longueur de l'assemblage. Pour les applications liées au couplage avec la thermohydraulique, le découpage des cellules est surtout fait verticalement, afin de prendre en compte les gradients de température tout au long du crayon. Une fois cette étape réalisée (qui n'est pas à négliger compte tenu de la complexité d'un réacteur nucléaire), le code MCNP est capable de déterminer le parcours de chaque neutron simulé dans la géométrie définie.

Toutes les équations régissant une fonction représentative de la population neutronique se déterminent toujours suivant la même approche : l'établissement d'un bilan neutronique entre les instants  $t$  et  $t + dt$  dans l'intervalle élémentaire des autres variables. Nous avons établi préalablement l'équation intégral-différentielle (cf. 2.1.2), où les variables  $\vec{r}$  et  $t$  apparaissent dans des opérateurs différentiels. Il est possible d'utiliser une forme équivalente de cette équation mais avec un opérateur intégral (opérateur de Peierls), car dans certains cas, l'étude de cette équation est bien plus simple écrite sous cette forme.

Celle-ci peut être établie si l'on suppose explicitement les sections efficaces indépendantes du temps. Le bilan de neutrons s'écrit donc comme :

- les neutrons observés en un point  $\vec{r}$  à la vitesse  $v$ , à l'instant  $t$ , et se dirigeant suivant une direction  $\vec{\Omega}$ ,
- sont ceux qui sont partis de l'ensemble des points  $\vec{r} - s\vec{\Omega}$  (avec  $s$  la distance entre ces deux points), à la vitesse  $v$ , à l'instant  $t - \frac{s}{v}$ , suivant la direction  $\vec{\Omega}$  et n'ayant pas subi de choc.

En considérant le domaine d'utilisation de l'équation comme fini (le parcours est de distance  $s$ ), alors la forme intégrale de l'équation de Boltzmann peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = & \int_0^\infty \exp\left(-\int_{s=0}^s \Sigma_t(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E) ds'\right) S(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}) ds \\ & + \int_0^\infty \exp\left(-\int_{s=0}^s \Sigma_t(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E) ds'\right) \\ & \times \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r} - s\vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') d\Omega' dE' \end{aligned} \quad (2.4)$$

<sup>7</sup>MCNPX le fait depuis peu, mais n'intègre pas un contrôle simple de cette évolution



Le principe de résolution de l'équation de transport au sein du code MCNP s'établit ainsi : il calcule une section efficace macroscopique totale d'interaction pour chaque matériau (composé de différents noyaux - fourni par l'utilisateur) à partir des données nucléaires :

$$\Sigma_t(E) = \sum_i \rho_i \sum_r \sigma_i^r(E) \quad (2.5)$$

avec  $\sigma_i^r(E)$  la section efficace microscopique de la réaction  $r$  sur le noyau  $i$  (probabilité d'interaction en fonction de l'énergie  $E$  de la particule incidente - unité : barns<sup>8</sup>), et  $\rho_i$  la concentration du noyau  $i$  (exprimée en  $10^{24} \text{ atomes/cm}^3$  ou en  $\text{atomes/barn.cm}$ ).

La section efficace macroscopique totale représente la probabilité par unité de longueur que la particule subisse une interaction avec la matière. L'inverse de cette quantité est donc ce que l'on appelle le libre parcours moyen<sup>9</sup> :  $\lambda(E)$ . MCNP peut alors simuler à proprement parler le transport de la particule dans la matière, par le biais d'une succession de tirages aléatoires censés représenter ce qui se produit en réalité. Le trajet de longueur  $x$  entre deux interactions est déterminé par la loi :

$$x(E) = -\lambda(E) \ln(1 - p) \quad (2.6)$$

avec  $p$  un nombre aléatoire tiré sur  $[0; 1[$  selon une loi uniforme.

Ce calcul permet de déterminer le site de l'interaction. De façon analogue, le type de noyau subissant l'interaction, puis le type de réaction en question sont déterminés. Ainsi le noyau dont la section macroscopique totale est la plus grande aura plus de chance que les autres d'être tiré, tout comme la section efficace la plus importante déterminera la réaction prépondérante. Ceci dit, c'est un tirage aléatoire qui est réalisé, et par le fait du hasard, les noyaux minoritaires peuvent être sélectionnés, il en va de même pour les réactions très peu probables. D'où la nécessité de simuler un très grand nombre d'histoires, permettant de suivre la loi des grands nombres, sinon les résultats peuvent être erronés<sup>10</sup>. Il reste alors à déterminer la suite de l'histoire du neutron (cas d'un calcul dit KCODE) :

- l'histoire s'arrête s'il y a absorption de la particule ou fuite,
- il peut y avoir émission de particules secondaires, auquel cas leur direction et énergie sont tirées selon les lois caractéristiques de la réaction responsable,
- et dans le cas d'une fission, le neutron incident est "mort", mais le site de la fission, le nombre de neutrons émis, l'énergie et la direction des neutrons issus de cette fission sont stockés puis propagés lors d'un nouveau cycle de transport (nouvelle génération de neutrons).

En effet, les calculs pour un système critique reposent sur un suivi des générations de neutrons : un grand nombre de neutrons est propagé à chaque cycle, et plusieurs cycles

---

<sup>8</sup>1 barn =  $10^{-24} \text{ cm}^2$

<sup>9</sup>Ce libre parcours moyen  $\lambda$  fonction de l'énergie du neutron, représente la distance moyenne entre le point de départ de celui-ci et le point où il va subir sa première collision

<sup>10</sup>C'est un phénomène non négligeable à garder à l'esprit même si le nombre d'histoires de neutrons simulées est très grand : certaines zones de la géométrie peuvent être que très peu visitées par les neutrons, et dans ce cas, la statistique sera insuffisante pour aboutir à des résultats exploitables (cf. Chapitre 3).

sont nécessaires afin d'assurer une précision acceptable. En procédant ainsi, d'interaction en interaction, de cycle en cycle, MCNP établit à partir des histoires individuelles des neutrons, un comportement du système simulé. Afin de pouvoir exploiter les résultats, soit pour une évolution combustible, soit pour un calcul couplé avec la thermohydraulique, il faut demander à MCNP de calculer :

- la valeur moyenne du flux dans chaque cellule,
- et les taux de réactions par noyau pour chaque matériau et pour chaque cellule.

### Calcul du flux de neutrons par cellule

Le flux, à une certaine énergie  $E$  dans une cellule ou dans un élément de volume  $V$ , peut s'écrire comme étant le rapport de la longueur totale parcourue par les neutrons d'énergie  $E$  au volume considéré. La longueur totale étant la somme des trajets élémentaires  $x_i(E)$  calculés préalablement et  $\omega_i$  le poids du neutron.

$$\Phi(E) = \frac{\sum_i x_i(E)}{V} \omega_i \quad (2.7)$$

Une fois ce flux fonction de l'énergie et d'une position établi, il est possible d'exploiter directement ces résultats afin de déterminer des taux de réactions par cellule ; MCNP peut aussi fournir à l'utilisateur un flux intégré en énergie :

$$\langle \Phi \rangle = \frac{1}{V} \int_E \int_{\vec{r}} \Phi(E, \vec{r}) dE d^3\vec{r} \quad (2.8)$$

### Calcul des taux de réaction des noyaux dans les cellules

Le calcul des taux de réaction sont indispensables pour l'évolution du combustible. De même, les puissances déposées localement ainsi que les taux de fission sont nécessaires aux calculs de thermohydraulique<sup>11</sup>. Ce calcul est réalisé par MCNP de la manière suivante :

$$R_i^j = N_i \int_E \sigma_i^j(E) \Phi(E) dE \quad (2.9)$$

Avec  $R$  le taux de réaction pour le noyau  $i$  et la réaction  $j$  au sein d'un matériau inclut dans une cellule et comportant  $N$  noyaux. Notons que des calculs à un groupe sont suffisants, tant pour l'évolution du combustible que pour la thermohydraulique.

Ces quelques exemples de calculs de grandeurs physiques nécessaires aux investigations sur les réacteurs nucléaires, nécessitent le traitement d'une grande masse de données (autant en entrée du code que la manipulation des fichiers de sortie). C'est pourquoi, dans un souci d'utilisation aisée, la majeure partie des tâches calculatoires ou laborieuses (comme la gestion des géométries ou des demandes de calculs à MCNP) est gérée par MURE et ces tâches seront explicitées dans la section 2.3.

<sup>11</sup>Tout comme le flux par cellule, les taux de réacteurs doivent être explicitement formulés par l'utilisateur dans le fichier d'entrée MCNP.

## 2.2 Calculs de thermohydraulique

### 2.2.1 Introduction

Un réacteur nucléaire a pour but la production d'énergie (principalement électrique) à partir de la fission du noyau. La simulation des fissions engendrant une augmentation de température dans les combustibles est assurée par les codes de neutroniques. Pour l'évacuation de la chaleur, et la quantification de l'énergie produite par l'unité, des codes de thermohydraulique simulant les transferts thermiques et le mouvement des fluides sont nécessaires. En effet, les limitations du domaine de fonctionnement normal du réacteur sont principalement liées aux quantités d'énergie qu'il est possible d'évacuer par le biais d'un fluide caloporteur.

Deux modes se distinguent :

- un mode de fonctionnement normal, pour lequel les limites de puissance sont dimensionnées en fonction des capacités des systèmes de production d'électricité (turbines). Ces mêmes limites doivent satisfaire également à la conduite du réacteur en toute sécurité (montée en puissance, arrêt d'une tranche, chargement et déchargement des assemblages, ...), et bien évidemment durant le fonctionnement nominal les contraintes thermiques et mécaniques sur les matériaux ne doivent pas endommager l'intégrité des gaines.
- un mode de condition accidentelle où à chaque instant du transitoire, il est nécessaire de s'assurer de la tenue des différentes barrières de confinement, de la bonne efficacité des systèmes de protection actifs ou passifs, et que toute la puissance résiduelle puisse être évacuée après l'activation des systèmes d'arrêt d'urgence.

Quel que soit le mode envisagé, il est nécessaire de s'assurer des conditions de sûreté en tout point du réacteur : les variables globales sont donc inadaptées. En effet la répartition de puissance est non uniforme dans le cœur, il est donc indispensable d'être capable d'évaluer le comportement des différentes structures en tout point et notamment sur les canaux chauds. Le dimensionnement thermique repose sur des grandeurs locales calculées à partir des profils 3D de puissance. Elles permettent de déterminer la puissance maximale possible du réacteur à partir des facteurs locaux, synonymes de valeurs maximales à ne pas dépasser.

Quelques exemples de grandeurs thermohydrauliques utilisées :

- Puissance volumique en  $W/m^3$ . Elle représente l'énergie dégagée par unité de temps et de volume. Cette donnée permet le calcul de la répartition des températures dans les éléments combustibles et la détermination des critères de non fusion de ces derniers.
- Masse volumique de flux de chaleur en  $W/m^2$ . C'est une énergie dégagée par unité de temps et de surface (surface de la gaine). Dans le cadre d'un flux de chaleur uniforme azimuthalement, cette grandeur est équivalente à la puissance linéique. Elle est surtout utilisée à des fins de dimensionnement thermique.
- Puissance linéique en  $W/m$ . Elle représente l'énergie produite par unité de temps et de longueur dans le combustible. Tout comme la masse volumique de flux de chaleur,

cette quantité est contrainte par les phénomènes pouvant porter atteinte à l'intégrité de la première barrière de protection : les gaines.

Les simulations couplées neutronique / thermohydraulique permettent aux concepteurs de nouveaux réacteurs, de s'assurer rapidement de la viabilité du système dans des conditions nominales, et d'estimer au premier ordre, une valeur maximale de puissance totale que le réacteur pourrait fournir. Il faut garder à l'esprit que les contraintes thermiques imposées lors du dessin d'un cœur, sont essentiellement liées au comportement du crayon combustible et de sa gaine tout au long de l'irradiation. Les principaux critères dont il faut s'assurer sont :

- la température du combustible doit toujours être bien inférieure à sa température de fusion (critère arbitraire et validé par l'autorité de sûreté),
- les contraintes thermo-mécaniques sur la gaine ne doivent pas altérer son intégrité,
- les températures du caloporteur ne doivent pas atteindre des valeurs critiques pour lesquelles les phénomènes d'oxydation de la gaine s'accélèrent, ce qui entraînerait une augmentation massive de la production d'hydrogène<sup>12</sup>.

### 2.2.2 Logiciels disponibles

Tout comme en neutronique, plusieurs types de code existent, mais ces codes ne réalisent généralement pas des simulations aux mêmes échelles :

- les codes système (échelle macroscopique : cœur + échangeurs de vapeur + boucles secondaires et tertiaires + pompes ...),
- les codes sous-canaux (échelle du cœur),
- et les codes de CFD <sup>13</sup> (généralement l'échelle est microscopique : quelques crayons, un assemblage)

#### Les codes système

Exemples : CATHARE[27], RELAP[28], ATHLET[17].

Les codes système sont généralement basés sur un modèle simplifié à une dimension, mais permettent en revanche de simuler les différentes boucles du système<sup>14</sup>, y compris pour certains codes, les générateurs vapeur et les écoulements à diphasiques. Le détail sur les canaux chauds, ou la carte des températures dans le cœur en 3D ne sont pas accessibles avec ce type de code. Cependant, ils sont très appropriés à la simulation couplée pour

<sup>12</sup>Rappelons que l'accident de Tchernobyl a été initié par une explosion vapeur provoquée par la rupture des gaines et la mise en contact du combustible "brûlants" avec l'eau du système de refroidissement ; quant à la seconde explosion qui souleva la dalle supérieure du cœur (2000 tonnes), elle a été causée par un dégagement d'hydrogène (produit par réaction électro-chimique entre la gaine et la vapeur d'eau à très haute température).

<sup>13</sup>Computational Fluid Dynamics - simulation numérique en mécanique des fluides

<sup>14</sup>Dans un REP, le circuit primaire permet l'extraction de la chaleur du cœur, le secondaire est responsable de la production de vapeur et son passage en turbine, et le troisième circuit assure le refroidissement du circuit secondaire.

des transitoires d'accident : le couplage déjà cité entre ATHLET (Analysis of Thermal-Hydraulics of LEaks Transient) et DYN3D en est un exemple pour les accidents en réacteur à eau bouillante. Le code du CEA CATHARE (Code Avancé de Thermohydraulique pour les Accidents sur les Réacteurs à Eau), est utilisé principalement pour les études de sûreté des REP. Il permet ainsi de fournir des réponses en ce qui concerne la gestion d'un accident et les actions à tenter. CATHARE a été couplé avec un code de diffusion neutronique (CRONOS2) et un code de thermohydraulique sous-canal (FLICA4). L'avantage d'un tel couplage par rapport à celui présenté dans cette thèse, ou à ceux cités précédemment, est sa vision à la fois large et focalisée qu'il apporte sur les phénomènes physiques qui entrent en jeu dans un réacteur nucléaire. En effet, il permet la simulation de la cuve en trois dimensions, et également la simulation complète des boucles primaire, secondaire et tertiaire. A titre d'exemple, dans un couplage neutronique thermohydraulique sur la cuve du réacteur, la température d'entrée dans le cœur est généralement prise comme constante, ou prédite par un modèle simple simulant les échanges thermiques entre le circuit primaire et secondaire. Alors qu'avec un couplage de type CATHARE-CRONOS-FLICA[29], des modèles validés et qualifiés sont utilisés à tous les niveaux. Des simulations d'accident comme la perte de réfrigérant (brèche dans le circuit primaire : LOCA<sup>15</sup>), ou une défaillance sur les générateurs de vapeur peuvent être réalisés avec un minimum d'hypothèses et de simplifications.

### Les codes sous-canaux

Exemples : COBRA[30], FLICA[31], MATRA[32], STAFAS[33].

Les codes sous-canaux<sup>16</sup>, de par leurs méthodes de résolution, sont prévus pour simuler les écoulements du circuit primaire dans le cœur. Leur maillage est dit sous-canal car chaque assemblage du cœur est représenté par des sous-canaux, formant des volumes de contrôle (cf. figure 2.3) dans lesquels sont résolus les équations de conservation. Ce type d'analyse s'est développé dans les années soixante pour les besoins du dimensionnement des systèmes d'arrêt d'urgence des cœurs de réacteurs à eau sous pression, car elle autorise l'évaluation locale du refroidissement des crayons combustibles les plus chauds.

Par exemple, FLICA4 est un code diphasique tridimensionnel pouvant réaliser des simulations en régime permanent ou transitoire. Il résout les trois équations de conservation pour le mélange diphasique (masse, quantité de mouvement, énergie), plus une quatrième équation de conservation de la masse pour la phase dispersée. Les échanges thermiques sont calculés à partir de corrélations dépendant de la nature de l'écoulement (convection simple phase, ébullition nucléée sous-refroidie ou saturée, ...) et de ses caractéristiques hydrauliques (turbulence, coefficient de frottement pariétal, ...).

### Les codes de CFD

Exemples : TRIO\_U[34], SATURNE[4], FLUENT[35], CFX[36].

---

<sup>15</sup>Loss Of Coolant Accident.

<sup>16</sup>Sub-channel.

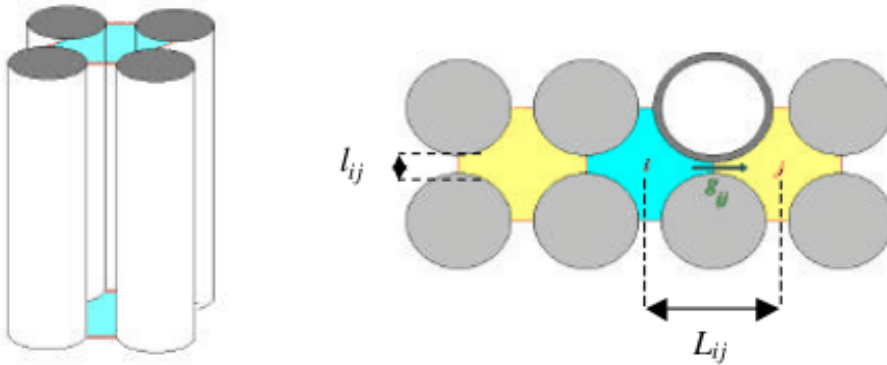


FIG. 2.3: Représentation géométrique de la modélisation sous-canal : Avec  $L_{ij}$  la distance entre les centres des canaux  $i$  et  $j$  ;  $l_{ij}$  la largeur de l'espace entre les crayons  $i$  et  $j$ . Cette modélisation permet le calcul des courants transverses notés  $g$  (vitesse massique transverse du fluide entre les canaux  $i$  et  $j$ ).

Ici on passe d'une modélisation continue à un modèle discret par l'utilisation d'une grille de maillage. La géométrie physique est modélisée fidèlement, puis discrétisée avec un maillage bien plus fin qu'avec un code sous-canal (cf. figure 2.4<sup>17</sup>). La taille typique des ces mailles est plus petite que les volumes de contrôle présentés ci-dessus. L'avantage est qu'à chaque noeud de la grille, les grandeurs physiques comme la vitesse, la pression, la concentration, sont disponibles. Les résultats issus de ce type de simulation sont bien plus précis et riches qu'avec les deux autres types de codes<sup>18</sup>. La complexité de la géométrie n'est ici pas un problème en ce qui concerne la modélisation, par contre, plus la géométrie est complexe ou grande, plus les coûts en terme de temps de calcul deviennent importants. C'est la raison pour laquelle, ces codes sont le plus souvent employés pour simuler de petites structures ou une partie réduite d'un élément beaucoup plus grand. Ainsi, même si la simulation d'un cœur est possible avec les codes de CFD, les temps de simulation et de besoin en mémoire risquent d'être prohibitifs.

### 2.2.3 Modélisation de la physique mise en jeu

Pour des raisons déjà évoquées dans le premier chapitre, le code COBRA a été sélectionné pour le couplage : il permet la simulation des canaux et assemblages en trois dimensions ainsi que les écoulements diphasiques. Il est aussi libre d'utilisation et disponible dans la base de données de la NEA<sup>19</sup>. L'utilisation de ce code est similaire à l'utilisation

<sup>17</sup>Réalisée avec le mailleur GMSH lors des premières investigations et prises en main des codes de thermohydrauliques potentiellement utilisables pour le couplage, l'emploi d'un mailleur externe était nécessaire car le code de CFD employé, SATURNE, n'en n'inclut pas.

<sup>18</sup>Les codes de CFD sont beaucoup utilisés dans les domaines de l'aéronautique, l'aérospatiale, la mécanique automobile, ... Ils permettent par exemple d'avoir accès aux champs de vitesse entourant un véhicule en déplacement (par la résolution des équations de Naviers-Stokes), ce qui permet d'améliorer par la suite son aérodynamisme.

<sup>19</sup><http://www.nea.fr/abs/html/nea-1614.html>

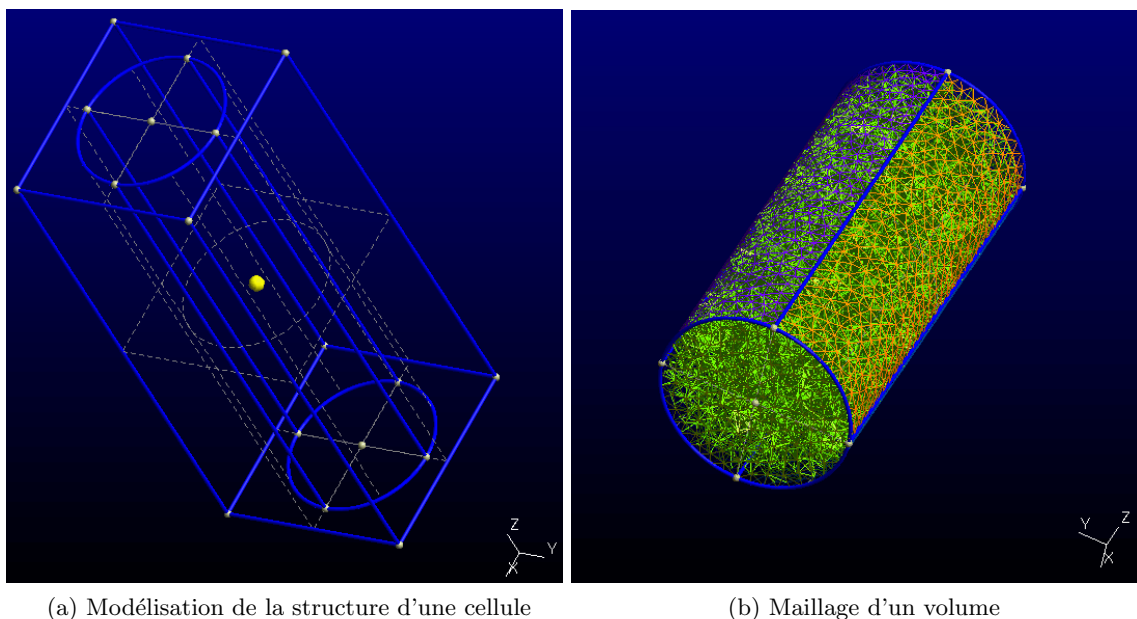


FIG. 2.4: Exemples de géométries simples avec un code de CFD, réalisées avec le mailleur GMSH.

du code MCNP dans le sens où COBRA utilise un fichier d'entrée, dans lequel sont formatées toutes les données nécessaires à l'exécution, et crée un fichier de sortie après avoir réalisé la simulation. Cependant, le fichier d'entrée ne se limite pas à une description du milieu comme pour MCNP, mais des modèles hydrauliques doivent en plus être spécifiés et de nombreuses données géométriques doivent être préalablement calculées (nombre de crayons de chaque type, nombre de sous-canaux, les connexions entre chacun d'eux, les périmètres mouillés et chauffants, les sections de passage, ...). Son utilisation nécessite des connaissances en thermohydraulique, c'est la raison pour laquelle un couplage automatisé a été réalisé.

Le code COBRA-EN (Coolant Boiling In Rod Arrays) a été développé à partir du code COBRA-3C/MIT[30]. La modélisation de l'écoulement du caloporteur est basée sur des modèles d'écoulement<sup>20</sup> qui décrivent les flux de masses liquides et vapeurs dans le système, et intègre des modèles de transferts de chaleur calculant l'échauffement des structures et les échanges convectifs du caloporteur.

Ce modèle est basé sur des postulats qui sont les principes de conservation[30] :

- conservation de la masse du mélange,
- conservation de la quantité de mouvement du mélange,
- conservation de l'énergie du mélange.

Les équations différentielles de conservation conduisent à système d'équations aux dif-

<sup>20</sup>Pour rappel, un modèle d'écoulement est un ensemble d'équations permettant de représenter le comportement de l'écoulement sous certaines conditions.

férences finies qui sont résolues par COBRA dans chaque volume de contrôle  $(i, j)$  (cf. figures 2.5 et 2.6).

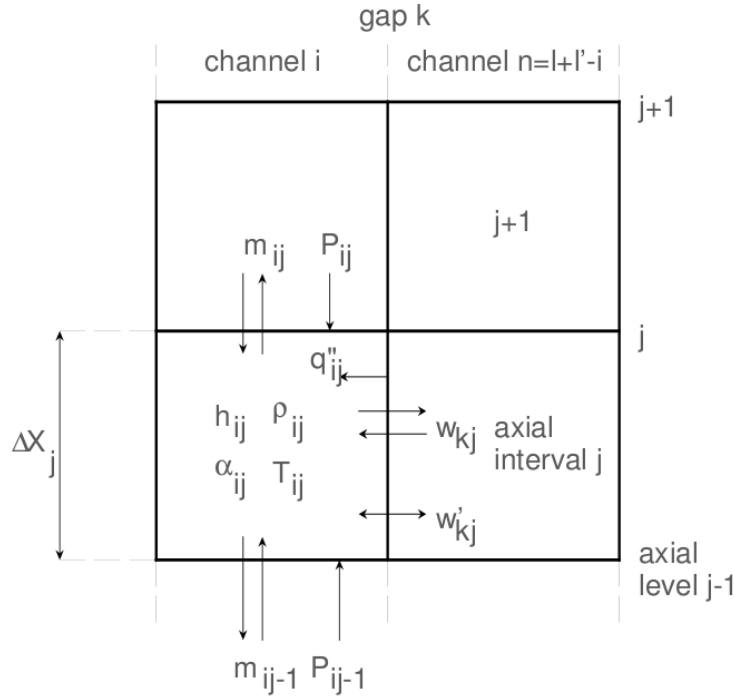


FIG. 2.5: Volumes de contrôle (vue latérale)

### Equation de conservation de la masse

$$A_i \frac{\Delta X_j}{\Delta t} (\rho_{ij} - \rho_{ij}^n) + m_{ij} - m_{ij-1} + \Delta X_j \sum_{k \in i} e_{ik} w_{kj} = 0 \quad (2.10)$$

Avec :

- $i$  l'indice du canal,
- $j$  l'indice du niveau axial,
- $k$  l'indice du "gap" de passage (connexion entre les sous-canaux permettant le calcul des courants transverses, le gap désigne la distance séparant deux structures juxtaposées comme deux crayons combustibles ou un crayon et un tube guide, cet espace sur toute la hauteur du crayon détermine l'interface de passage : cf. figures 2.5 et 2.6),
- $A$  la surface de passage ( $m^2$ ),
- $\rho$  la masse volumique du mélange ( $kg/m^3$ ) :  $\alpha \rho_v + (1 + \alpha_l) \rho_l$ ,
- $\rho^n$  la masse volumique du mélange au pas précédent ( $kg/m^3$ ),
- $\rho_l$  la masse volumique de la phase liquide ( $kg/m^3$ ),



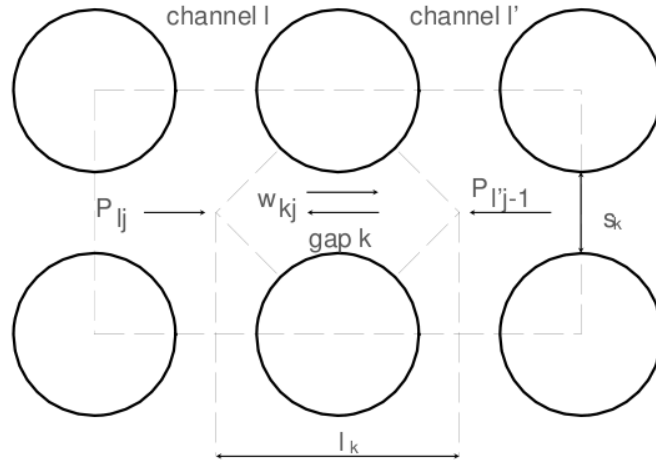


FIG. 2.6: Volumes de contrôle (vue d'en haut)

- $\rho_v$  la masse volumique de la phase vapeur ( $kg/m^3$ ),
- $\alpha$  la fraction de vide (elle est calculée pour chaque élément de volume en fonction des choix de modélisation choisis par l'utilisateur : modèle EPRI, corrélation de Smith, corrélation d'Armand, ...),
- $m_{ij}$  le débit masse axial ( $kg/s$ ) du canal  $i$  entre le niveau axial  $j$  et  $j + 1$ ,
- $w_{kj}$  le courant transverse ( $kg/m/s$ ) au niveau axial  $j$  entre les canaux adjacents au canal  $i$ ,
- $e_{ik}$  l'orientation des courants transverses ( $e_{ik} = \pm 1$  - positif si le courant est sortant de la cellule),
- $n$  l'indice du canal adjacent délimité par le gap  $k$ .

Le premier terme correspond à la quantité de masse dans le volume de contrôle, les autres représentent les flux de matière : le premier ( $m_{ij}$ ) décrit les transferts de masse provenant du volume de contrôle au dessous de celui considéré, le second ( $m_{ij-1}$ ) les fuites de masses vers le volume de contrôle du dessus, et le dernier pour les courants transverses.

### Equation de conservation de la quantité de mouvement

La modélisation mathématique des quantités de mouvement se divise en deux équations représentatives de la quantité de mouvement axiale (équation 2.11) et radiale (équation 2.12).

L'équation de conservation de la quantité de mouvement axiale :

$$\begin{cases} \frac{\Delta X_j}{\Delta t} (m_{ij} - m_{ij}^n) + m_{ij} U'_{ij} + \Delta X_j \sum_{k \in i} e_{ik} w_{kj} U_{kj}^{*'} = -A_i (P_{ij} - P_{ij-1}) \\ -g A_i \Delta X_j \rho_{ij} \cos \theta - \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta X f \phi^2}{D_h \rho_l} + K v'^* \right)_{ij} |m_{ij}| \frac{m_{ij}}{A_i} - f_T \Delta X_j \sum_{k \in i} w'_{kj} (U'_{ij} - U'_{nj}) \end{cases} \quad (2.11)$$

Avec :

- $g$  l'accélération de la pesanteur ( $m/s^2$ ),
- $P$  la pression ( $Pa$ ),
- $\theta$  le degré d'inclinaison du canal par rapport à la verticale,
- $f$  le facteur de friction pariétale,
- $\phi^2$  le facteur de friction en double phase,
- $K$  le coefficient de perte de charge des grilles d'espacement,
- $f_T$  le facteur correctif des courants transverses,
- $v'$  le volume spécifique effectif défini comme :  $v' = \frac{x^2}{\alpha \rho_v} + \frac{(1-x)^2}{(1-\alpha) \rho_l}$  ( $m^3$ ),
- $U'$  la quantité de mouvement relative effective définie comme :  $U' = \frac{m}{A} v'^*$  ( $kg.m/s$ ).

Les termes de gauche de l'égalité correspondent à l'emmagasinement d'une quantité de mouvement, ainsi qu'aux flux axial et transverse. Pour la seconde partie de l'égalité :

- le premier terme représente l'impact de la différence de pression axiale,
- le second terme prend en compte la baisse de pression due à l'élévation du fluide,
- le troisième terme permet la simulation des pertes de charge de frictions,
- et le dernier correspond au bilan de quantité de mouvement radial due aux turbulences.

L'équation de conservation de la quantité de mouvement radiale :

$$\frac{\Delta X_j}{\Delta t} (w_{kj} - w_{kj}^n) + \overline{U'_{kj} w_{kj}^*} - \overline{U'_{kj-1} w_{kj-1}^*} = \frac{s_k}{l_k} \Delta X_j P_{kj-1} - \frac{1}{2} \left( K_G \frac{\Delta X v'^*}{sl} \right)_{kj} |w_{kj}| w_{kj} \quad (2.12)$$

Avec :

- $\overline{U'_{kj}}$  la quantité de mouvement pour le gap ( $kg.m/s$ ),
- $P_{kj-1}$  la différence de pression entre deux canaux adjacents ( $Pa$ ),
- $K_G$  le coefficient de perte de charge,
- $s$  l'épaisseur du gap.

La partie gauche de l'égalité est la somme du stockage de la quantité de mouvement et des flux transverses. La partie droite se décompose en un terme prenant en compte les écarts de pression et d'un autre décrivant les pertes de charge dues aux frictions au passage du gap.

### Equation de conservation de l'énergie

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{A_i}{\Delta t} \left[ \rho_{ij}'' (h_{ij} - h_{ij}^n) + h_{ij} (\rho_{ij} - \rho_{ij}^n) \right] + \frac{1}{\Delta X_j} (m_{ij} h_{ij}^* - m_{ij-1} h_{ij-1}^*) + \sum_{k \in i} e_{ik} w_{kj} h_{kj}^* \\ & = \sum_{r \in i} P_r \Phi_{ir} q_{rj}'' - \sum_{k \in i} w'_{kj} (h_{ij} - h_{nj}) - \sum_{k \in i} C_k s_k (T_{ij} - T_{nj}) + \sum_{r \in i} r_Q \Phi_{ir} q'_{rj} \end{aligned} \right. \quad (2.13)$$

Avec :

- $r$  l'indice du crayon,
- $\Phi_{ir}$  la fraction de puissance relâchée dans le canal  $i$  par le crayon  $r$ ,
- $P_r$  le périmètre chauffant du crayon  $r$  ( $m$ ),
- $h$  l'enthalpie du mélange tel que :  $h = x h_v + (1 - x) h_l$  ( $J/kg$ ),
- $x$  la qualité de l'écoulement (rapport entre le débit vapeur et le débit total :  $x = \frac{G_v}{G} = \frac{\rho_v \alpha U_v}{\rho U_v}$ ),
- $h_l$  l'enthalpie de la phase liquide ( $J/kg$ ),
- $h_v$  l'enthalpie de la phase vapeur ( $J/kg$ ),
- $h_n$  l'enthalpie du pas précédent ( $J/kg$ ),
- $q''$  la masse volumique de flux de chaleur ( $J/m^2/s$ ),
- $q'$  la puissance linéique ( $J/m/s$ ),
- $w'$  les courants transverses turbulents ( $kg/m/s$ ),
- $T$  la température ( $K$ ),
- $n$  l'indice du canal adjacent connecté par le gap  $k$ ,
- $C_k$  la conductivité thermique du fluide ( $W/m^2/K$ ),
- $r_Q$  la fraction de puissance déposée directement dans le fluide,
- $\rho''$  la masse volumique dite effective[30].

Le premier terme correspond au stockage de l'énergie dans le volume, le second représente les échanges d'énergie axialement, et le troisième les échanges par courants transverses. Pour la seconde partie de l'égalité, le premier terme décrit la puissance déposée dans le volume de contrôle par les crayons inclus dans le sous-canal, le second exprime les échanges dus à la turbulence, le troisième ceux dus à la conduction et le dernier prend en compte les dépôts de puissance qui chauffent directement le fluide.

Toutes ces équations sont résolues pour chaque volume de contrôle. En ce qui concerne les courants transverses, il est à noter qu'ils ne sont pas calculés dans chaque direction. Par exemple, pour un pavage carré (type REP), ces courants sont déterminés dans deux directions, ainsi de proche en proche et pour chaque volume de contrôle, tous les courants peuvent être calculés (cf. figure 2.7). Ceci implique la connaissance des connexions entre chaque volume de contrôle, ce qui représente une difficulté supplémentaire dans le cadre d'un couplage qui se veut générique (cf. chapitre 3).

Ces équations régissent le mouvement du fluide, mais nécessitent la connaissance de certaines propriétés du caloporteur, comme les fonctions d'état, et aussi des relations de fermeture, c'est-à-dire des conditions aux limites qu'il faut aussi modéliser (exemple : frottement aux parois, échanges de chaleur, ...).

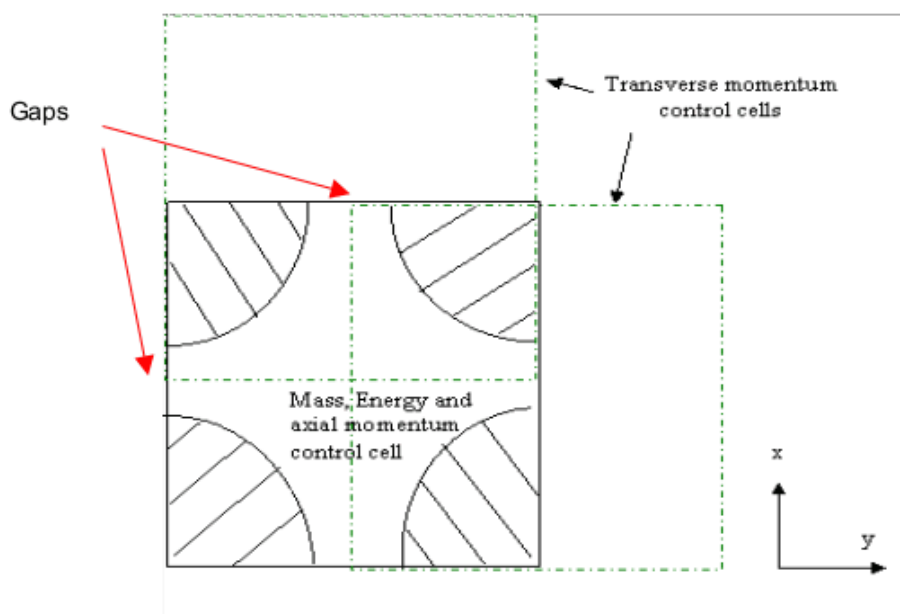


FIG. 2.7: Résolution des équations dans les volumes de contrôle

### Modélisation des échanges de chaleur

Trois types d'échanges de chaleur existent : la conduction, la convection et les échanges radiatifs<sup>21</sup>. Le traitement de ces échanges sous COBRA se décline en plusieurs étapes :

- un modèle de conduction dans le combustible et dans la gaine,
- un modèle de conduction dans l'espace libre entre la gaine et la pastille combustible (appelé lame de gaz),
- et enfin un modèle de convection sur la paroi de la gaine pour les échanges avec le fluide caloporteur.

**Conduction dans les structures** Le modèle de traitement des échanges de chaleur à l'intérieur des structures impose une géométrie cylindrique. Ce qui est généralement le cas : les crayons combustibles se composent d'une pastille fissile, entourée d'une gaine. A sa fabrication, la gaine n'est pas en contact avec la pastille, mais un espace entre ces deux structures est maintenu (son épaisseur est de l'ordre du pourcent du rayon de la pastille).

L'équation résolue pour la conduction dans les structures est l'équation de la chaleur en une dimension (les transferts de chaleur axiaux<sup>22</sup> et angulaires sont négligeables devant les transferts de chaleur radiaux : les isothermes sont cylindriques) :

<sup>21</sup>Les échanges de chaleur radiatifs suivent la loi de Stefan, ce qui implique qu'ils n'aient une importance significative que sous certaines conditions accidentelles : en effet le rayonnement ne devient prépondérant que sous très haute température, qui sont bien supérieures aux valeurs en fonctionnement normal.

<sup>22</sup>Lors de la discrétisation axiale d'un crayon combustible, lors de la discrétisation axiale, l'utilisateur devra maintenir dans chaque maille une *hauteur*  $\gg$  *diamètre*.

$$(\rho C_p V)_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = Q_{i-1,i} A_{i-1} + Q_{i+1,i} A_i + Q_i''' V_i \quad (2.14)$$

Avec :

- $\rho$  la masse volumique ( $kg/m^3$ ),
- $C_p$  la capacité calorifique ( $J/kg/K$ ),
- $V$  le volume de la maille traitée ( $m^3$ ),
- $T$  la température au noeud considéré ( $K$ ),
- $r_{i-1}$  et  $r_i$  les coordonnées radiales qui encadrent le noeud  $i$  (cf. figure 2.8),
- $Q_{i-1,i}$  le flux de chaleur du noeud  $(i-1)$  sur  $i$  :  $Q_{i-1,i} = -k \partial T / \partial r|_{r=r_{i-1}}$  ( $W/m^2$ ),
- $A_{i-1}$  la surface d'échange de chaleur entre le noeud  $(i-1)$  et  $i$  ( $m^2$ ),
- $Q_{i+1,i}$  le flux de chaleur du noeud  $(i+1)$  sur  $i$  :  $Q_{i+1,i} = +k \partial T / \partial r|_{r=r_i}$  ( $W/m^2$ ),
- $A_i$  la surface d'échange de chaleur entre le noeud  $i$  et  $(i+1)$  ( $m^2$ ),
- $k$  la conductivité thermique ( $W/m/K$ ),
- $Q'''$  la puissance volumique ( $W/m^3$ ).

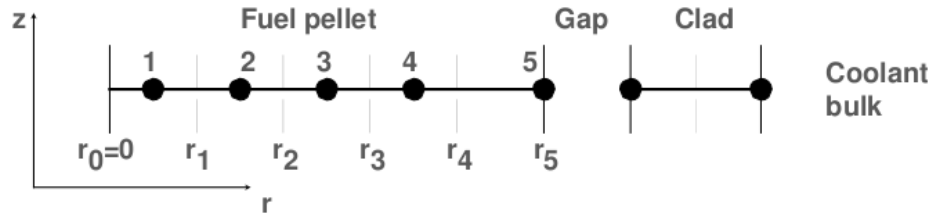


FIG. 2.8: Maillage dans les structures pour le traitement des échanges thermiques

**Echanges thermiques dans la lame de gaz** Le modèle traite les phénomènes de conduction dans le gaz et de radiation (modèle VIPRE[37]). Mais il n'inclut pas de modèles de déformation ou d'échanges de chaleur par contact. Pour utiliser cette modélisation, les quantités de matière en gaz (Helium, Xénon, Argon, Krypton, Hydrogène, Azote) doivent être spécifiées. Cependant une alternative à cette modélisation existe : une constante peut alors être choisie par l'utilisateur pour le coefficient d'échange thermique. C'est le choix qui a été fait pour le benchmark présenté au chapitre 4 :  $h_{gap} = 10^4 W/m^2/K$ .

**Echanges convectifs avec le caloporteur** La modélisation des transferts thermiques convectifs se déterminent ainsi :

$$q'' = h(T_p - T_m) \quad (2.15)$$

Avec :

- $q''$  la masse volumique de flux de chaleur ( $W/m^2$ ),
- $T_p$  la température pariétale<sup>23</sup> ( $K$ ),

<sup>23</sup>Température en paroi : couche externe de la gaine

- $T_m$  la température de mélange<sup>24</sup> du caloporteur ( $K$ ),
- $h$  le coefficient d'échange thermique ( $W/m^2/K$ ).

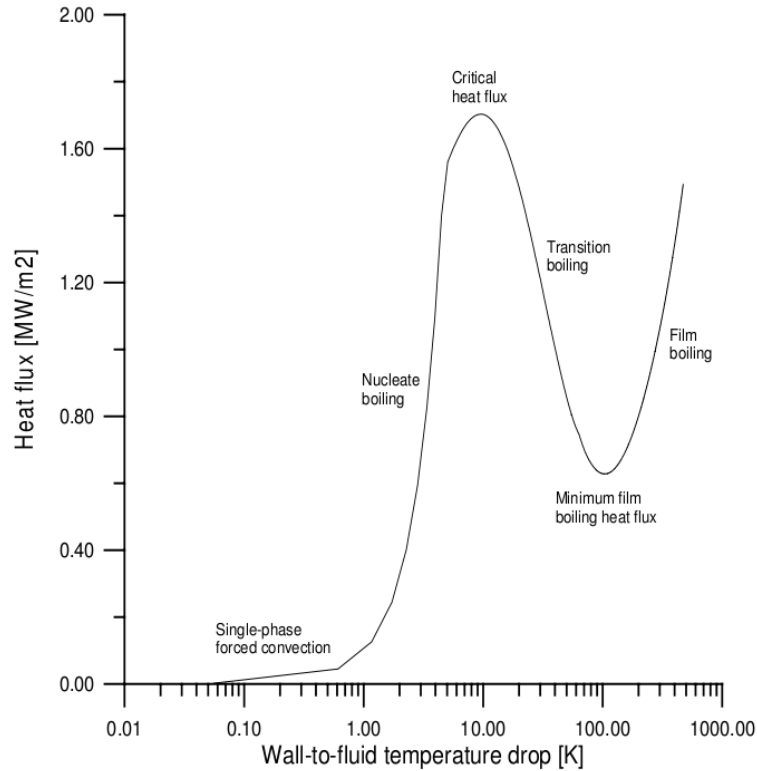


FIG. 2.9: Courbe de Nukiyama

La valeur du coefficient  $h$  est déterminée par COBRA en fonction du régime d'ébullition (cf. figure 2.9) :

- convection forcée monophasique liquide,
- ébullition nucléée sous-refroidie,
- ébullition nucléée à saturation,
- ébullition de transition,
- ébullition en film,
- et convection forcée en simple phase vapeur.

La détermination des caractéristiques d'écoulement est primordiale pour l'évaluation des différentes températures en régime d'ébullition (cf. figure 2.10). Par exemple dans le cas des REP, un départ d'ébullition sur le canal chaud est possible, mais si le code ne prend pas en compte les phénomènes d'ébullition, alors les températures seront sur-évaluées. En effet le coefficient d'échange thermique augmente rapidement dès l'apparition des premières bulles de vapeur car le changement de phase liquide-vapeur permet une meilleure extraction de

<sup>24</sup>Température moyenne du caloporteur dans la maille considérée

la chaleur.

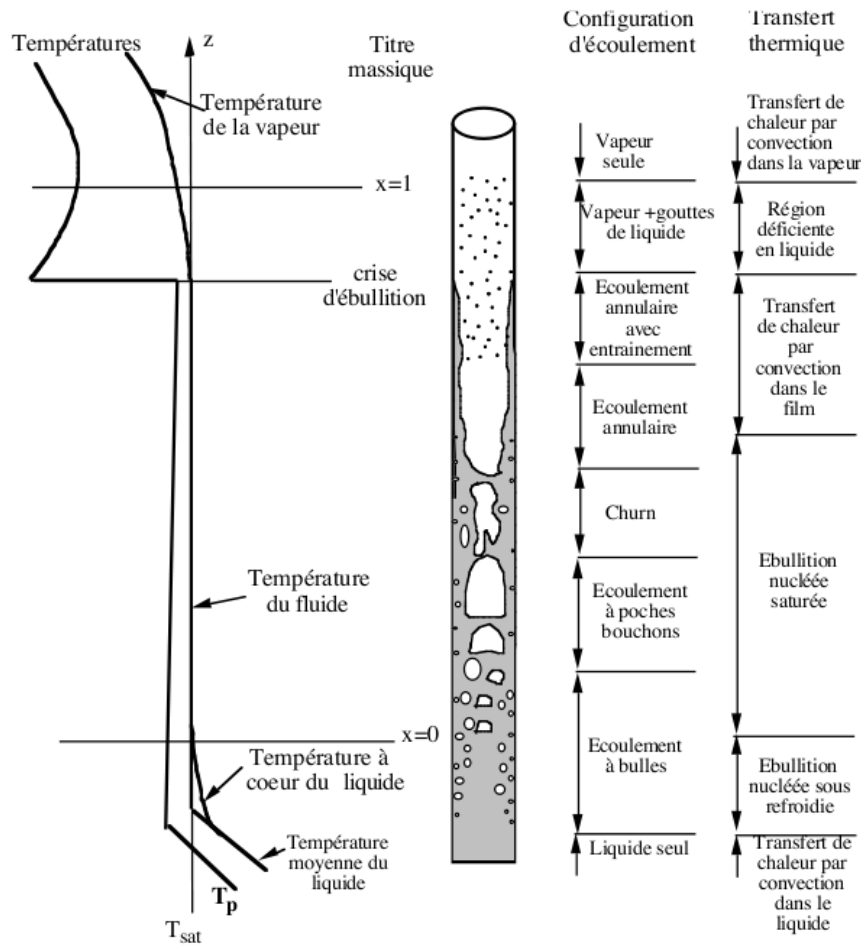


FIG. 2.10: Les différents régimes de l'ébullition convective

## 2.3 L'outil MURE

### 2.3.1 Introduction

MURE[38] (MCNP Utility for Reactor Evolution<sup>25</sup>) est un code développé à l'IPN d'Orsay et au LPSC de Grenoble. Celui-ci, qui peut également être perçu comme un ensemble d'outils pour les simulations de neutronique utilisant MCNP, est écrit en langage orienté objet (C++) et comprend environ 40000 lignes de code. Son développement est assuré par 10 hommes-an.

MURE est né de la volonté de réaliser des études d'évolution combustible à partir de calculs de taux de réactions issus d'un code Monte Carlo (cf. section 2.3.2).

<sup>25</sup>MURE est disponible en téléchargement à la NEA - package 1845.

MURE peut aussi être seulement utilisé comme interface au code MCNP : il gère par exemple la construction des géométries et leur transcription en langage MCNP, la recherche et l'écriture des codes des matériaux aux températures souhaitées et le fichier XSDIR associé<sup>26</sup>, la construction des tallies pour les calculs de taux de réaction, ... Un utilisateur de MURE peut ainsi réaliser des simulations MCNP sans jamais créer directement les jeux de données d'entrée MCNP et peut s'abstenir d'exploiter lui-même les fichiers de sortie. MURE dispose en effet des options nécessaires permettant, au travers de classes, de rechercher l'information dans les fichiers de sorties MCNP. MURE dispose également d'une interface graphique conviviale pour l'exploitation des résultats (cf. figure 2.11).

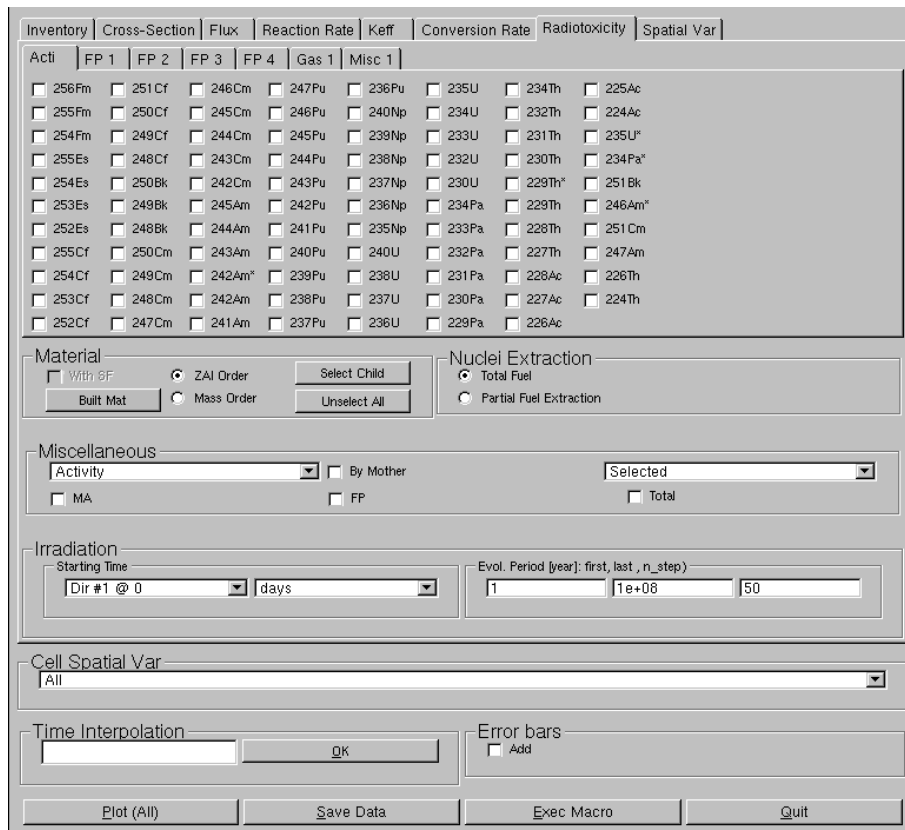


FIG. 2.11: Interface MureGui pour le post-traitement des résultats

En ce qui concerne la description de la géométrie, la modélisation dans MURE s'accorde avec la manière dont elle est réalisée dans MCNP, mais elle se fait de façon plus aisée et orientée objet. Ainsi l'utilisateur définit des objets renvoyant à des formes géométriques, qui peuvent être déjà prédéfinies dans les classes (ce qui simplifie encore la modélisation, cf. figure 2.12). Un effort important a été fourni par les développeurs de MURE afin de gérer au mieux les noeuds : intersections et unions permettant la définition de structures com-

<sup>26</sup>le fichier XSDIR contient les codes de tous les matériaux utilisés et nécessaires à l'exécution de MCNP avec le lien pour chacun d'eux vers un autre fichier regroupant leurs valeurs de section efficace



plexes. De même que dans MCNP, l'association de formes géométriques et de matériaux constituent des cellules.

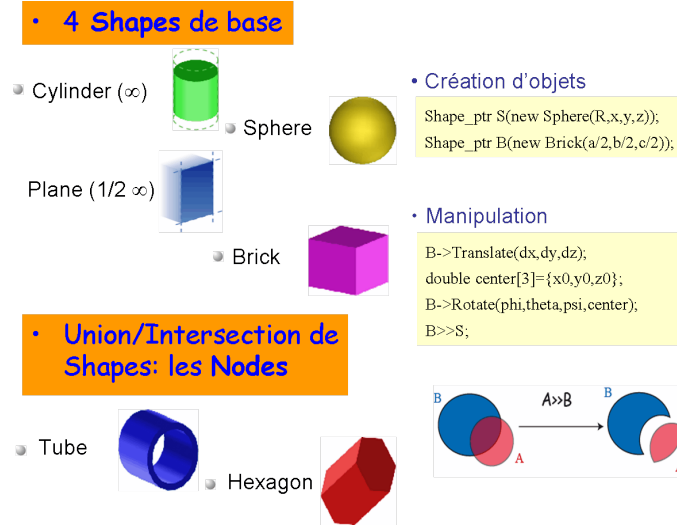


FIG. 2.12: Création de la géométrie avec l'outil MURE

### 2.3.2 Traitement de l'évolution des matériaux

MCNP calcule les flux dans chaque cellule pour une géométrie et des compositions de matériaux donnés. A partir de ces résultats d'irradiation des matériaux, MURE résout numériquement les équations d'évolution de Bateman (cf. équation 2.16) pour chaque noyau du système considéré.

$$\frac{\partial N_i(t)}{\partial t} = -\lambda_i N_i(t) + \sum_j \lambda_j^{j \rightarrow i} N_j(t) + \sum_{j'} N_{j'}(t) r_{j'} \langle \sigma_{j'}^{j' \rightarrow i} \phi \rangle - N_i(t) \sum_r \langle \sigma_i^{(r)} \phi \rangle \quad (2.16)$$

avec :  $\langle \sigma \phi \rangle = \int \sigma(E) \phi(E) dE$ .

Les deux premiers termes représentent les réactions de décroissance, et les deux suivants les réactions nucléaires. C'est une équation bilan dans laquelle sont symbolisés par  $j \rightarrow i$  les noyaux indicés  $j$  conduisant, par décroissance ou par réaction, à la production de noyaux indicés  $i$ . Le vecteur  $N(t)$  représente les concentrations à l'instant  $t$  des radionucléides membres d'une chaîne de filiation radioactive. Les rapports de branchement  $r$  sont connus : les relations de filiations ont été préalablement listées<sup>27</sup>. Les modes de décroissances utilisés sont ceux de la librairie JEFF et de la référence[39]. Modélisé sous forme d'arborescence, cet arbre des noyaux peut être simplifié<sup>28</sup> afin d'économiser du temps de calcul.

<sup>27</sup>Exemple : les rapports de branchement sont égaux à 1 pour les réactions de capture (sauf pour le cas de l'<sup>241</sup>Am), et au rendement de fission pour le cas des produits de fission.

<sup>28</sup>Simplification par temps de demi-vie minimum, par suppression des réactions peu significatives, ...

Une fois construit pour chaque noyau composant une cellule, et pour chaque cellule évolutive, ce système d'équations couplées est résolu par la méthode d'intégration Runge-Kutta. Un algorithme intégrateur d'ordre 4 à pas variable a été retenu[40]. Cependant nous supposons que le flux calculé au dernier pas MCNP et utilisé pour le calcul MURE d'évolution des matériaux reste quasi-inchangé. Dans la pratique, les premiers temps d'évolution font appel à plus de calculs MCNP car le combustible n'est pas irradié uniformément dans le tout le cœur (facteurs de forme très important en début de vie).

Un calcul d'évolution dans MURE se présente comme un enchaînement de calculs de flux (MCNP) et d'irradiation de la matière (MURE au travers de la résolution des équations de Bateman). Ce processus itératif (cf. figure 2.13) est répété ainsi jusqu'au dernier temps d'évolution souhaité. Celui-ci comprend trois étapes majeures :

- exécution d'un calcul MCNP au temps  $t_i$ ,
- lecture des taux de réactions et des flux calculés par MCNP, puis résolution des équations de Bateman,
- génération d'un nouveau fichier d'entrée MCNP prenant en compte les nouvelles compositions isotopiques pour le calcul à  $t_{i+1}$ .

Au cours d'un calcul d'évolution, différents paramètres de contrôle peuvent être utilisés comme :

- le maintien d'un calcul à puissance du réacteur constante,
- le maintien du facteur de multiplication effectif constant (actions sur des poisons consommables ou les barres de contrôle),
- la prise en compte d'un rechargement combustible avec les temps de refroidissement associés[41], ...

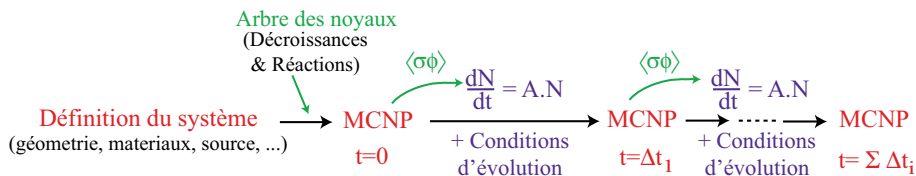


FIG. 2.13: Principe général du traitement de l'évolution dans MURE

### 2.3.3 Accélération des calculs par une méthode multi-groupes

Lorsque des taux de réactions sont nécessaires dans une simulation neutronique avec MCNP, deux tallies doivent être employés. L'un est pour déterminer le flux (tally F4) dans un volume et l'autre pour déterminer un taux de réaction (correspondant à l'association d'un tally de flux F4 avec un tally multiplicateur FM). Dans le calcul considéré, MCNP calcule donc l'intégrale du flux pondéré par une section efficace macroscopique (cf. équation 2.9). Le problème de cette méthode est que MCNP a besoin, pour chaque valeur d'énergie de neutrons, de récupérer la valeur de la section efficace pour les calculs de taux de réaction. Ces valeurs sont stockées dans la mémoire vive au travers de tableaux, mais la recherche

de la section efficace a l'énergie voulue est coûteuse en temps de calcul.

Pour remédier à cela, une voie différente a été choisie grâce à la supervision du code MCNP par MURE[42]. Pour le calcul du même taux de réaction, nous ne réalisons qu'un seul calcul de flux en fonction de l'énergie (tally F4) dans MCNP. Une fois la simulation terminée, c'est MURE lui même qui va calculer les taux de réactions. Ainsi, un seul accès disque est réalisé à la fin du calcul, en remplacement de la recherche des valeurs de section efficace dans les tableaux à chaque cycle. De plus, nous travaillons sur des groupes d'énergies et non plus en ponctuel (imposé par cette méthode de calcul : l'obtention d'un flux en fonction de l'énergie impose un découpage énergétique explicite). C'est un découpage très fin qui a été réalisé, et donc aucune correction d'autoprotection n'est nécessaire<sup>29</sup>. Par défaut, MURE utilise 17900 groupes (cf. figure 2.14).

Energie	10 <sup>-4</sup> eV - 1eV	1eV - 10eV	10eV - 10keV	10keV - 0.1MeV	0.1MeV - 20MeV
Nombre de bins/décade	100	500	5000	1000	500

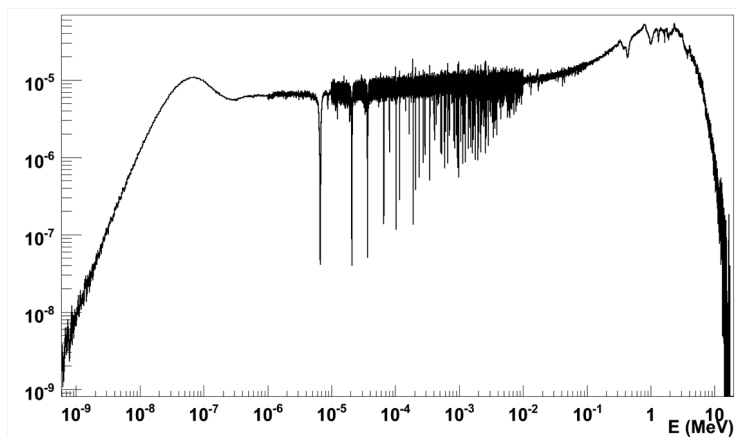


FIG. 2.14: Découpage énergétique pour les calculs en multi-groupes

Le gain sur les temps de calcul sont de l'ordre de :

- au moins 30 fois plus rapide avec un calcul sur un processeur
- au moins 16 fois plus rapide avec un calcul parallélisé sur 8 processeurs

L'erreur induite par la mise en groupe est de l'ordre du pourcent en comparaison aux calculs à énergie ponctuelle. Cette erreur est due à l'absence d'autoprotection dans le domaine thermique ; et dans le domaine rapide, à la non prise en compte des tables de probabilité pour les résonances non résolues.

<sup>29</sup>Au premier ordre, les corrections d'autoprotection sont négligeables

## Chapitre 3

# Couplage des codes de neutronique et de thermohydraulique

L'utilité d'un couplage neutronique thermohydraulique a été introduite dans le premier chapitre. Elle s'inscrit dans la logique de l'enrichissement des codes de calculs. Cependant une notion importante doit être soulignée, elle fait d'ailleurs parti du cahier des charges à respecter dans ce travail de thèse : conserver l'aisance de la réalisation des simulations neutroniques antérieures de MURE. De bonnes connaissances en thermohydraulique et en mécanique des fluides sont toujours préférables, mais nous le verrons au cours de ce chapitre, elles ne sont pas indispensables à la réalisation d'études couplées avec le code MURE.

Une seconde difficulté, elle aussi informatique, devait être surmontée : la compatibilité des nouvelles méthodes des classes liées au couplage avec toutes les autres méthodes déjà existantes, et celles qui seront développées dans le futur. Cet aspect, ajouté à la nécessité d'avoir un couplage générique (non lié à un type de réacteur nucléaire), furent des étapes délicates à gravir. Mais ces contraintes présentent l'avantage de maintenir le code MURE à un haut degré d'efficacité : tant en termes de possibilités de simulations qu'en termes d'améliorations ultérieures.

### 3.1 MURE comme logiciel de supervision

La première démarche pour la création d'un ensemble d'outils (de codes) simple d'utilisation, consiste à faire communiquer l'utilisateur avec un seul et unique code/langage. C'est MURE qui assure cette gestion, ce n'est qu'avec les méthodes MURE, écrites en C++, que l'utilisateur du système couplé traitera. L'inconvénient à cela est que toutes possibilités doivent être envisagées au préalable. Chose qui demeure délicate à réaliser. C'est là que l'utilité du langage informatique C++ prend tout son sens. En effet, si le code est correctement écrit, l'ajout de nouvelles méthodes est possible a posteriori, sans

modification des classes déjà réalisées.

La simplification des méthodes à utiliser pour réaliser une simulation couplée est aussi rendue possible par la manière dont a été écrit MURE. Toutes les méthodes des différentes classes sont indépendantes les unes des autres et peuvent se solliciter entre elles et communiquer ensemble. Cet aspect était indispensable dans le cadre de cette thèse. Un couplage générique n'aurait pas pu être réalisé sans cela. Néanmoins certaines limitations, dues au code de thermohydraulique COBRA sont à garder à l'esprit : en effet, seuls des écoulements dans un réseau de tubes cylindrique est possible. Par exemple la simulation d'un réacteur à plaques, comme le RJH (Réacteur Jules Horowichth), n'est pas possible. Cependant, malgré l'aspect académique du code BATH (cf. section 3.2), celui-ci maintient la possibilité de réaliser des études sur des réacteurs à géométrie "non conventionnelle"<sup>1</sup>, moyennant de bonnes connaissances en thermohydraulique et en mécanique des fluides.

MURE assure seul l'interface homme machine. Il gère la création de la géométrie et les calculs arithmétiques associés pour les codes de neutronique et de thermohydraulique. Il assure également la bonne mise en oeuvre des codes, ainsi que leurs communications et la mise à jour des données échangées et les conséquences que cela implique, notamment en ce qui concerne les sections efficaces dépendantes en température pour les simulations MCNP.

Différentes classes prennent en charge la modélisation : une classe s'occupant de la modélisation des réseaux 3D pour la partie purement neutronique<sup>2</sup> et une classe gérant la partie thermohydraulique, héritant de la première.

Pour la partie neutronique, la classe se nomme *ReactorMesh*<sup>3</sup>. Elle assure la création de tous les objets nécessaires à la simulation, à savoir la duplication des matériaux, structures et cellules, et leurs cohésions au sein d'une matrice 3D symbolisant une modélisation en trois dimensions. Elle gère toute la partie descriptive de la géométrie : les plénums, le nombre de crayons, de tubes guides ou autres structures, ainsi que leurs positions.

Pour la partie thermohydraulique la classe s'appelle *COBRA*<sup>4</sup>. Elle se décline en trois fichiers gérant respectivement :

- la construction des objets spécifiques à la thermohydraulique, le calcul de toutes les grandeurs nécessaires à la réalisation de la simulation, l'identification des structures, sous-canaux et volumes de contrôle et leurs connexions, et également le recouvrement des maillages entre les géométries neutronique et thermohydraulique,
- l'écriture du fichier d'entrée du code COBRA,
- la relecture du fichier de sortie du code COBRA, le calcul des moyennes, si un groupement de cellules a été réalisé, ainsi que l'actualisation des nouvelles températures et masses volumiques.

<sup>1</sup>au regard de la grande majorité des réacteurs existants dont le cœur est un pavage de crayons.

<sup>2</sup>Classe qui peut être utilisée indépendamment d'un calcul couplé mais simplement dans le cadre d'une simulation neutronique.

<sup>3</sup>*ReactorMesh* comprend environ 2000 lignes de code.

<sup>4</sup>*COBRA* comprend environ 2000 lignes de code.

### 3.2 Traitement simplifié de la thermohydraulique

Le code BATH (Basic Approach of Thermal-Hydraulics), intégré dans les classes du code MURE, assure la généricité du couplage neutronique thermohydraulique<sup>5</sup>. En effet, le code COBRA-EN présenté précédemment, ne permet en l'état actuel des choses, que la simulation numérique des écoulements en eau dans un réseau de crayons.

BATH, qui est une approche analytique de la physique régissant les échanges de chaleur, n'a pas la prétention d'être un code en soi de simulation thermohydraulique, mais fournit par contre des résultats acceptables, qui permettent d'avoir une première idée sur un concept novateur. Une limitation à ce code repose sur les équations qui sont résolues : il ne permet que la simulation d'écoulement monophasique sur un canal moyen (les courants transverses ne sont pas pris en compte). En revanche, n'importe quel fluide caloporteur peut être simulé, du moment que les grandeurs thermodynamiques s'y rapportant sont fournies, et que certaines corrélations d'échanges sont également mentionnées. Actuellement, ce code permet la simulation de :

- l'eau légère, l'eau lourde et le sodium liquide pour les caloporteurs[43, 44, 45, 46, 47, 48, 49],
- le zircaloy et l'acier pour les structures[50, 51],
- l'oxyde d'uranium (UOX), le MOX ( $PuUO_2$ ), et l'oxyde de thorium pour les pastilles combustibles creuses ou pleines[52].

Tout autre fluide caloporteur, structures de gainage ou type de combustible peut être rajouté au code, en fournissant simplement les fichiers de grandeurs thermodynamiques s'y rapportant comme les valeurs de capacité calorifique ou de masse volumique, ... Toutes ces valeurs doivent être fonction de la température. Des modules d'interpolation en spline cubique sont utilisés pour l'interpolation des valeurs aux bonnes températures. L'interpolateur qui lie les points  $(x_k, y_k)$  et  $(x_{k+1}, y_{k+1})$  est de forme polynomiale du troisième ordre :

$$s_k(x) = s_{k,0} + s_{k,1}(x - x_k) + s_{k,2}(x - x_k)^2 + s_{k,3}(x - x_k)^3 \text{ avec } x \in [x_k, x_{k+1}] \quad (3.1)$$

Il est soumis à des contraintes de continuité sur les valeurs interpolées ainsi que sur les dérivées premières et secondes.

Une observation doit être faite : la courbe représentant les valeurs qui seront susceptibles d'être interpolées, ne présente pas de variations importantes de pente. En effet, de par les limitations imposées par les équations résolues dans BATH, aucun changement de phase ne peut être pris en compte (ce qui induirait des variations brutales sur certaines

---

<sup>5</sup>A l'origine, ce code a été créé afin de réaliser le premier couplage neutronique thermohydraulique. En effet, l'intérêt de ce code était de pouvoir plus facilement cibler les difficultés informatiques et physiques liés au couplage inter-disciplinaire. Ainsi, on a pu se concentrer sur un problème à la fois. Alors que si COBRA avait été couplé directement, plusieurs problèmes indépendants se seraient manifestés en même temps, et le debuggage en aurait été gravement affecté. Cependant, ce code n'a pas été abandonné, car les résultats qu'il fournissait étaient honorables et qu'il est facilement modifiable et évolutif.

grandeurs thermodynamiques). Si dans l'avenir de telles variations doivent être envisagées, alors une méthode d'interpolation plus robuste devra remplacer l'actuelle (par exemple en faisant appel aux polynômes de Tchebychev).

A la différence de COBRA, l'utilisation d'un couplage neutronique thermohydraulique avec BATH nécessite un petit peu plus d'intervention de l'utilisateur. A savoir :

- le repérage des canaux “typiques” à simuler (par exemple un canal moyen par assemblage) grâce à une numérotation par zone radiale,
- le repérage des niveaux axiaux pour chaque canal (ces seuls deux ajouts dans le jeu d'entrée assurent la communication entre la neutronique et la thermohydraulique),
- la spécification des dimensions (rayon interne et externe de la pastille combustible, épaisseur de la lame de gaz et de la gaine, surface de la cellule élémentaire et sa hauteur),
- la spécification des structures et matériaux (nature du caloporteur, de la gaine et du combustible, ex : eau, acier et MOX),
- et les conditions de fonctionnement (température d'entrée du circuit primaire et son débit massique, et la puissance).

Seules ces données, descriptives, sont nécessaires, tous les calculs des grandeurs présentées ci-dessous sont réalisés automatiquement.

### 3.2.1 Relations de base résolues

Les bases de la thermique reposent sur la loi de Fourier[53], qui donne l'expression du flux de chaleur en fonction du gradient de température dans un élément de volume solide :

$$\vec{\phi} = -\lambda \cdot \overrightarrow{\text{grad}T} \quad (3.2)$$

Avec :

- $\phi$  le flux de chaleur ( $W/m^2$ ),
- $\lambda$  la conductivité thermique du matériau ( $W/m/K$ ),
- $T$  la température du matériau ( $K$ ).

A partir de cette loi, on peut en déduire l'équation de la chaleur en effectuant un bilan énergétique : la chaleur recueillie par le milieu est égale à la somme des sources de chaleur internes et externes (cf. équation ci-dessous).

$$C_p \cdot \rho \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = P_v + (-\text{div} \vec{\phi}) \quad (3.3)$$

Pour la résolution des équations de thermique et de thermohydraulique, le code BATH définit un canal élémentaire, qui dépendra de l'organisation structurale des crayons combustible dans les assemblages (cf. figure 3.1) : ce canal s'échauffe grâce à la puissance dissipée par un crayon dans le cas d'un maillage carré, et d'une demi aiguille dans le cas d'un maillage hexagonal de type RNR. Les calculs sont faits dans le cadre d'une simulation en régime permanent. Le canal est découpé axialement afin d'avoir accès aux dépôts d'énergie locaux et de bénéficier d'un couplage neutronique thermohydraulique en 2D RZ.

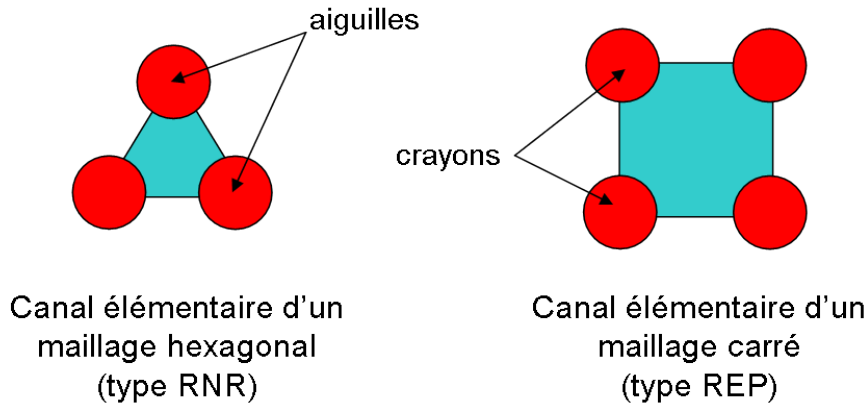


FIG. 3.1: Canaux élémentaires pour les modélisations thermohydrauliques

### 3.2.2 Echauffement du fluide caloporteur dans une tranche axiale

Le bilan énergétique pour chaque tranche axiale est le suivant : toute la chaleur dissipée est recueillie dans le caloporteur. Ainsi :

$$T_{\text{caloporteur}}^{\text{sortie}} = T_{\text{caloporteur}}^{\text{entrée}} + \frac{q_p A}{\langle \dot{m} C_p \rangle} \quad (3.4)$$

Avec :

- $T_{\text{caloporteur}}$  la température du caloporteur en entrée ou en sortie de la cellule considérée (K),
- $q_p$  la masse volumique de flux de chaleur en paroi ( $W/m^2$ ) - équivalent à  $q''$ ,
- $A$  l'aire de la surface d'échange ( $m^2$ ),
- $\dot{m}$  le débit massique du caloporteur ( $kg/s$ ),
- $C_p$  la capacité calorifique du caloporteur ( $J/kg/K$ ).

### Calcul de la température de paroi de la gaine

Quand on se rapproche de la gaine, on observe une augmentation progressive de la température du caloporteur (cf. figure 3.2). Cependant cette augmentation ne sera calculée que sous forme de bilan : nous n'aurons pas accès finement au gradient de température, mais seulement à la valeur du saut entre la température moyenne du caloporteur et la température de paroi de la gaine. Cet écart est dépendant du type de convection (naturelle ou forcée) et de la nature du caloporteur (liquide, métal liquide, gaz, ...). C'est au travers du coefficient d'échange thermique  $h$  que ces aspects physiques seront pris en compte :

$$T_{eg} = \overline{T_c} + \frac{q_p}{h} \quad (3.5)$$

Avec :

- $T_{eg}$  la température en paroi de la gaine (K),
- $\overline{T_c}$  la température moyenne du caloporteur telle que  $\overline{T_c} = \frac{T_{\text{caloporteur}}^{\text{sortie}} + T_{\text{caloporteur}}^{\text{entrée}}}{2}$  (K),



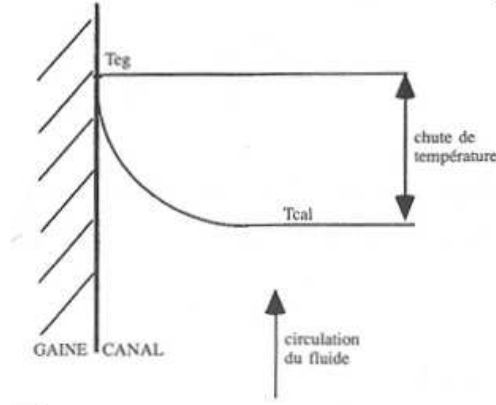


FIG. 3.2: Couche limite thermique

- $h$  le coefficient d'échange thermique ( $W/m^2/K$ ).

Le coefficient d'échange thermique se calcule avec l'aide des nombres adimensionnels :

$$h = \frac{Nu \cdot k}{D_h} \quad (3.6)$$

Avec :

- $Nu$  le nombre de Nusselt,
- $k$  la conductivité thermique du caloporteur ( $W/m/K$ ),
- $D_h$  le diamètre hydraulique tel que  $D_h = \frac{4S}{P}$  ( $m$ ),
- $S$  la section de passage du fluide ( $m^2$ ),
- $P$  le périmètre mouillé ( $m$ ).

Le nombre de Nusselt<sup>6</sup> se calcule au moyen de corrélations pré-établies et dépendantes de la nature de l'écoulement (ces corrélations sont valables pour certaines plages de valeurs d'autres nombres adimensionnels représentatifs des conditions d'écoulement).

- Cas de l'eau légère ou de l'eau lourde :

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4} \quad (3.7)$$

C'est la corrélation de Dittus-Boelter, valable pour des nombres de Reynolds (noté  $Re$ ) et de Prandtl (noté  $Pr$ ) compris entre :

$$\begin{cases} 2500 < Re \leq 10^5 \\ 0.7 \leq Pr \leq 160 \end{cases} \quad (3.8)$$

- Cas des métaux liquides comme le sodium :

$$Nu = 6.3 + 0.0167 Re^{0.85} Pr^{0.93} \quad (3.9)$$

C'est la corrélation de Notter et Sleicher, valable pour des nombres de Reynolds et de Prandtl compris entre :

<sup>6</sup>Le nombre de Nusselt représente le rapport du temps de diffusion thermique sur le temps de réponse thermique.

$$\begin{cases} 10^4 < Re < 10^6 \\ 4.10^{-3} \leq Pr \leq 0.1 \end{cases} \quad (3.10)$$

Afin de calculer le coefficient d'échange thermique par l'intermédiaire du nombre de Nusselt, deux autres nombres adimensionnels doivent être connus.

- Le nombre de Prandtl<sup>7</sup> qui se définit comme :  $Pr = \frac{\mu C_p}{k}$ .
- Le nombre de Reynolds<sup>8</sup> tel que  $Re = \frac{\rho U D_h}{\mu}$ .

Avec :

- $\mu$  la viscosité dynamique ( $N.s/m^2$ ),
- $\rho$  la masse volumique ( $kg/m^3$ ),
- $U$  la vitesse ( $m/s$ ).

Des systèmes d'avertissement ou d'arrêt du calcul ont été mis en place pour le cas où les conditions d'utilisation des corrélations thermohydrauliques seraient violées.

### 3.2.3 Conduction dans la gaine

On fait l'approximation que la gaine n'est pas soumise à des dépôts de chaleur. Ainsi, pour déterminer la conduction de la chaleur dans la gaine, on résout l'équation de Laplace :  $\nabla^2 T = 0$ , avec l'approximation que les gradients de températures longitudinaux et angulaires sont nuls (les isothermes sont fonction du rayon). Cette approximation est valable si la hauteur de chaque volume considéré est très supérieure à l'épaisseur de la gaine.

$$T_g(r) = T_{eg} + \frac{q'}{2\pi \cdot k(T)} \ln\left(\frac{r_{eg}}{r}\right) \quad (3.11)$$

Avec :

- $T_g(r)$  la température au rayon  $r$  de la gaine ( $K$ ),
- $q'$  la puissance linéique ( $W/m$ ),
- $k(T)$  la conductivité thermique de la gaine en fonction de la température ( $W/m/K$ ),
- $r_{eg}$  le rayon extérieur de la gaine ( $m$ ).

Cette résolution se fait sur chaque noeud de calcul (le nombre est arbitraire). La valeur de la conductivité thermique est donc actualisée à chaque noeud, soit par interpolation si les valeurs de  $k$  sont fournies sous forme de tabulation, soit grâce à une corrélation.

- Corrélation pour la conductivité thermique du zircaloy :

$$k_{Zr} = 12.767 - 5.4348.10^{-4} \cdot T + 8.9818.10^{-6} \cdot T^2 \quad (3.12)$$

- Corrélation pour la conductivité thermique de l'acier 316 SS :

$$k_{SS} = 9.0109 + 1.5298.10^{-2} \cdot T \quad (3.13)$$

<sup>7</sup>Le nombre de Prandtl est le rapport des effets visqueux sur les effets thermo-conductifs, il sera donc faible pour les gaz et grand pour les huiles

<sup>8</sup>Le nombre de Reynolds caractérise l'apparition de la turbulence, il est le rapport entre l'inertie et le frottement visqueux

### 3.2.4 Chute de température dans la lame de gaz entre la pastille combustible et la gaine

Le calcul de la chute de température dans la lame de gaz est un aspect beaucoup plus compliqué à modéliser que la plupart des autres phénomènes physiques qui entrent en jeu dans les simulations de réacteurs nucléaires. En effet, plusieurs facteurs interviennent pour l'évaluation du coefficient d'échange thermique dans le jeu radial.

A la construction d'une aiguille combustible, un espace entre la pastille et la gaine est créé. Généralement il est rempli d'un gaz inerte (He) sous pression. Cependant, dès le début de l'irradiation plusieurs altérations structurelles apparaissent, en voici les principales :

- dilatation radiale et axiale thermique non uniforme de la pastille et de la gaine (entraînant une diminution du jeu - cf. figure 3.4),
- relâchement de gaz de fission dans le combustible, qui par migration atteignent la lame de gaz (pollution de l'hélium par les gaz de fission).

Or, pour déterminer le coefficient d'échange thermique dans ce milieu, le jeu radial et la composition du milieu doivent être parfaitement connus. En effet si on appelle  $h$  ce coefficient alors il peut s'exprimer ainsi :

$$h = h_c + h_r + h_{cond} \quad (3.14)$$

Avec :

$h_c$  le coefficient d'échange thermique de contact (pour le cas où la pastille combustible et la gaine sont en contact physique),

$h_r$  le coefficient d'échange thermique radiatif (celui-ci ne dépend que des températures et des propriétés des matériaux, donc il n'est pas affecté par les aspects présentés ; en revanche, son rôle est négligeable sauf en cas d'accident grave pour lequel les températures sont plusieurs fois supérieures aux températures à puissance nominale),

$h_{cond}$  le coefficient d'échange thermique par conduction dans le gaz (celui-ci dépend du jeu radial et de la composition isotopique du gaz).

Tous ces coefficients dépendent de paramètres très difficilement modélisables, même par l'utilisation d'un code de thermomécanique. Ainsi, même si l'emploi couplé d'un code de thermomécanique aurait l'avantage de s'assurer de la bonne tenue des crayons combustibles et gaines aux sollicitations fortes auxquels ils sont contraints, une description fine et réaliste de la conduction dans cette lame de gaz ne serait pas pour autant atteignable.

En conséquence, deux méthodes empiriques sont envisageables :

- soit forcer un saut de température en utilisant la littérature (l'ordre de grandeur pour les REP est de 30 degrés, et de 280 degrés pour les RNR[53]),
- soit utiliser une valeur constante pour le coefficient global d'échange thermique ( $h$ ) dans la lame de gaz, également issue de la littérature ou d'autres calculs (dans un REP l'ordre de grandeur est de  $10^4 \text{ W/m}^2/\text{K}$ [54]) et l'utiliser dans la corrélation :

$$T_{ec} = T_{ig} + \frac{q'}{2\pi h r_{ec}} \quad (3.15)$$

Avec :

- $T_{ec}$  la température en surface de la pastille combustible ( $K$ ),
- $T_{ig}$  la température intérieure de la gaine ( $K$ ),
- $r_{ec}$  le rayon externe de la pastille combustible.

### 3.2.5 Conduction dans la pastille combustible

Plusieurs approximations sont nécessaires pour la modélisation des échanges de chaleur dans la pastille combustible. Premièrement, comme cité précédemment, nous faisons l'hypothèse que l'intégrité de la pastille est conservée, tout comme ses caractéristiques de conduction de la chaleur (ce qui revient à négliger l'apparition des gaz de fission et sa déformation<sup>9</sup>). L'approximation que toute la puissance est déposée dans le combustible est aussi retenue, comme celle de considérer que les gradients de températures sont radiaux. Ainsi, l'équation décrivant la conduction dans la pastille est une équation de Poisson :  $k\nabla^2 T + Q''' = 0$ . Soit :

$$T_c(r) = T_{ec} + \frac{Q'''}{4k(T)} \left[ (r_{ec}^2 - r^2) + 2r_{ic}^2 \ln \left( \frac{r}{r_{ec}} \right) \right] \quad (3.16)$$

Avec :

- $T_c(r)$  la température au rayon  $r$  du combustible ( $K$ ),
- $Q'''$  la puissance volumique ( $W/m^3$ ),
- $r_{ic}$  le rayon interne de la pastille combustible ( $m$ ).

### 3.2.6 Evaluation des pertes de charges

Même si l'impact des pertes de charges sur les données thermohydrauliques du caloporteur ne sont pas prises en compte, une indication de cette valeur est fournie à l'utilisateur (on se place dans le cas d'écoulement permanent, incompressible, monophasique et turbulent en conduite lisse).

$$\Delta P_{total} = \Delta P_{accélération} + \Delta P_{gravité} + \Delta P_{irréversibilités} \quad (3.17)$$

Les pertes de charge dues à l'accélération peuvent être négligées car les variations de vitesses sont négligeables en fonctionnement normal.

Les pertes de charge dues à la gravité sont des pertes réversibles (conservation de l'énergie mécanique) :

$$\Delta P_{gravité} = \rho g h \sin \theta \quad (3.18)$$

avec  $\rho$  la masse volumique ( $kg/m^3$ ),  $g$  l'accélération de la pesanteur ( $m/s^2$ ),  $h$  la hauteur de l'élément simulé ( $m$ ), et  $\theta$  l'angle de la conduite par rapport à l'horizontale en degrés.

---

<sup>9</sup>Rappelons que ces données sont difficilement quantifiables. Même si le taux de production de gaz de fission a fait l'objet de plusieurs simulations, l'impact de la migration des gaz et des sites de bullage est bien moins évident à déterminer.

Les pertes de charge irréversibles se décomposent en deux parties : celles dues au frottements sur la paroi de la gaine (frottements de Darcy[55]), et celles dues aux singularités (passage au travers d'une grille de maintien par exemple).

$$\Delta P_{frottements} = f \frac{L}{D} \rho \frac{U^2}{2} \quad (3.19)$$

Avec :

- $f$  le coefficient de frottement de *Darcy – Weisbach*,
- $L$  la longueur de l'écoulement ( $m$ ),
- $D$  le diamètre hydraulique équivalent de la conduite ( $m$ ),
- $U$  la vitesse d'écoulement du fluide ( $m/s$ ).

Pour l'estimation du coefficient de *Darcy – Weisbach*, la corrélation de *Mc Adams* a été retenue :  $f = 0.184 Re^{-0.2}$ , valable pour des nombres de Reynolds tels que  $30000 < Re < 1000000$ .

En ce qui concerne les pertes de charge par singularités, elles s'expriment ainsi :

$$\Delta P_{singularités} = K \frac{\rho U^2}{2} \quad (3.20)$$

Avec  $K$  le coefficient de perte de charge de la singularité. Ces coefficients sont spécifiques à chaque type d'obstacle rencontré[56].

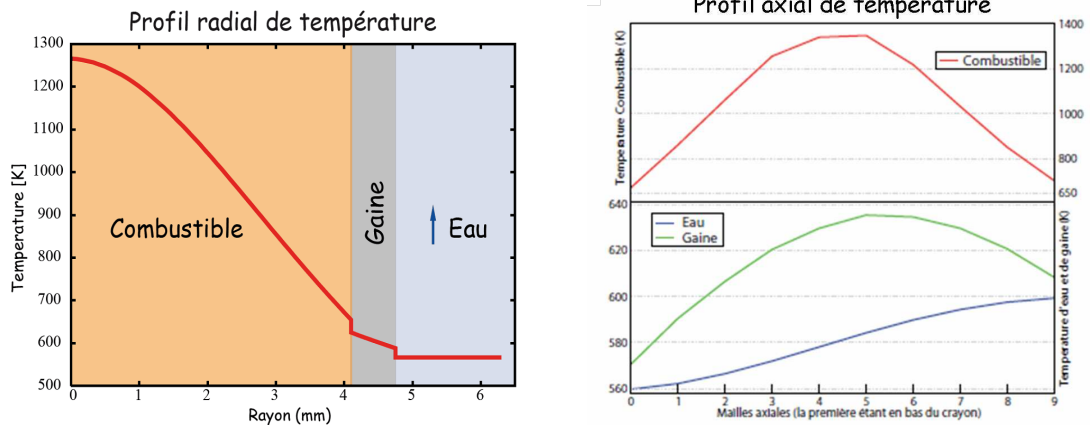


FIG. 3.3: Illustration de résultats de calculs couplés avec BATH sur un assemblage REP

### 3.2.7 Réflexions sur les modélisations thermohydrauliques

Il est important de garder à l'esprit, que quel que soit le degré de finesse que l'on peut obtenir avec un code de thermohydraulique, certains paramètres nous échappent. La résolution des équations couplées de la mécanique des milieux continus et de la thermohydraulique donne de très bons résultats. Mais ces calculs sont rendus complexes par la modification des propriétés de matériaux due à leur évolution au cours de l'irradiation et

aux paramètres de fonctionnement du réacteur (cf. figure 3.4[53]). A cela viennent s'ajouter les phénomènes physico-chimiques très complexes : interaction des gaz de fission avec la pastille combustible, interaction du caloporteur avec les structures, ...

Ainsi, un choix a été fait dans le cadre de cette thèse : la mécanique n'a pas été ajoutée au package MURE. En effet, même si les lois régissant le calcul des contraintes, déformations élastiques et plastiques, dilatation thermique, gonflement ou fissuration sont connues, leur ajout dans MURE aurait induit plus d'incertitudes sur les résultats qu'il n'aurait amené d'amélioration en terme de précision. De plus, enrichir le code d'aspects mécaniques sans utiliser ces résultats pour des ajustements de données thermohydrauliques aurait été regrettable.

Le couplage avec un code qualifié de thermo-mécanique, riche en termes de possibilités de simulation, serait une voie cohérente avec le travail réalisé.

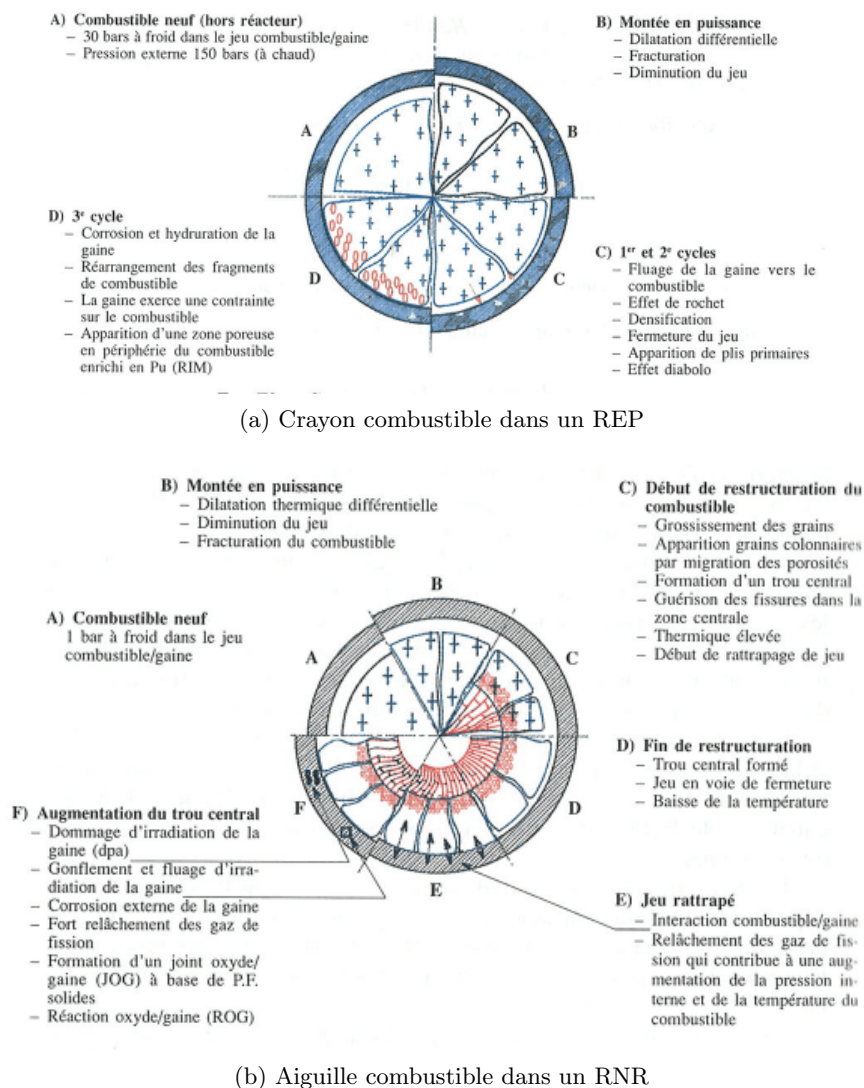


FIG. 3.4: Comportement des crayons et aiguilles combustible sous irradiation

### 3.3 Gestion de la géométrie

L'utilisation d'un code Monte Carlo, MCNP dans notre cas, présente l'avantage, parmi d'autres, d'avoir une approche purement descriptive de la géométrie du système simulé. Cependant, la modélisation des structures composant un cœur de réacteur peut être très laborieuse suivant le code utilisé. C'est donc un des atouts de MURE, qui se charge de transcrire en langage MCNP la géométrie que l'utilisateur lui aura spécifiée de manière plus conviviale. Rappelons en effet, que la modélisation d'une géométrie sous MURE est beaucoup plus aisée que sous MCNP. Même si MCNP inclut tout comme MURE des structures élémentaires comme des tubes, des hexagones, ..., la manipulation de ces formes prédéfinies, ou de toute autre structure est par contre aisément faisable dans MURE, tout comme les modifications géométriques des éléments déjà existants dans la simulation. Le langage C++ orienté objet assure lui aussi la facilité des manipulations.

Cependant, même si créer un réseau de crayons, puis un réseau d'assemblages composés de ces crayons sous MURE ne demande pas un temps exagéré, l'étape qui consiste à les différencier les uns des autres (c'est à dire réaliser des duplications indépendantes) est nettement plus longue et donc sujette à des erreurs. De plus, il est autant nécessaire de faire une différenciation axiale afin de prendre en compte l'échauffement du fluide le long de l'assemblage et également les disparités de températures radiales.

Prenons un exemple simple : la simulation d'un quart de cœur de réacteur sans tubes guides et composé des mêmes crayons (dimensions, compositions, enrichissements). Rien qu'au niveau structural cela représente la création d'une cinquantaine d'assemblages composés d'une centaine de crayons chacun, chaque crayon disposant d'une pastille combustible, d'une gaine et d'une cellule représentant le caloporteur. Grâce à la simulation par réseaux (implémenté dans MCNP et dans MURE), cela reste une tâche concevable dans des temps raisonnables. Mais dans le but d'une simulation couplée avec la thermohydraulique, il faut aussi découper chaque crayon de chaque assemblage une dizaine de fois, afin d'avoir une différenciation également axiale. Sans parler de la création de chaque matériau, de leurs associations à des structures afin de former des cellules, de la création d'une géométrie analogue dans le langage du code de thermohydraulique, de la gestion de l'identification une à une de chaque cellule et volume de contrôle et de leur communication, ... ; la seule modélisation de la géométrie devient très longue à réaliser et surtout pratiquement inutilisable pour des applications futures qui nécessitent des modifications (dimensions, enrichissements, ...). De plus, une telle approche obligerait l'utilisateur à se former à la manipulation du code de thermohydraulique. Or le but de cette thèse est de fournir un outil de simulation couplée à des neutroniciens.

C'est dans ce souci d'utilisation simple, tant en neutronique, que pour des simulations couplées, que la classe `ReactorMesh` a été créée. Nous le verrons, la simulation d'un cœur de réacteur, même très hétérogène au sein même de chaque assemblage, devient une tâche plus aisée.

### 3.3.1 Neutronique

La classe `ReactorMesh` assure la réalisation du maillage par l'utilisation d'outils dédiés. Non seulement ils permettent de ne plus avoir à gérer des structures comme sous MURE, mais en passant par les méthodes de la classe `ReactorMesh` toutes les dimensions et positionnement dans l'espace sont gérés automatiquement. Ainsi pour créer un assemblage, il suffit de spécifier les dimensions des rayons combustibles, d'épaisseur de gaine et le pas de la cellule élémentaire, ainsi que les matériaux associés. En quelques lignes de code on obtient directement un assemblage avec ses centaines de crayons. Si pour les besoins de la simulation, un découpage axial est nécessaire, alors il suffit de préciser le nombre de niveaux axiaux souhaités et le découpage et duplications associées sont réalisées automatiquement.

La gestion des géométries plus complexes est assurée par le même type de méthode. Cependant les structures doivent être préalablement déterminées dans la classe `ReactorMesh`. En l'état actuel, plusieurs types de structures ont été implémentées à savoir (cf. figure 3.5) :

- les tubes guides,
- les barres de contrôle,
- les crayons dits exotiques avec différentes couches annulaires de combustible (couches avec des poisons consommables ou différents enrichissements),
- et la gestion des plénums (surtout utilisé pour la cohérence de l'homogénéisation des températures en sortie de cœur quand un calcul couplé est réalisé).

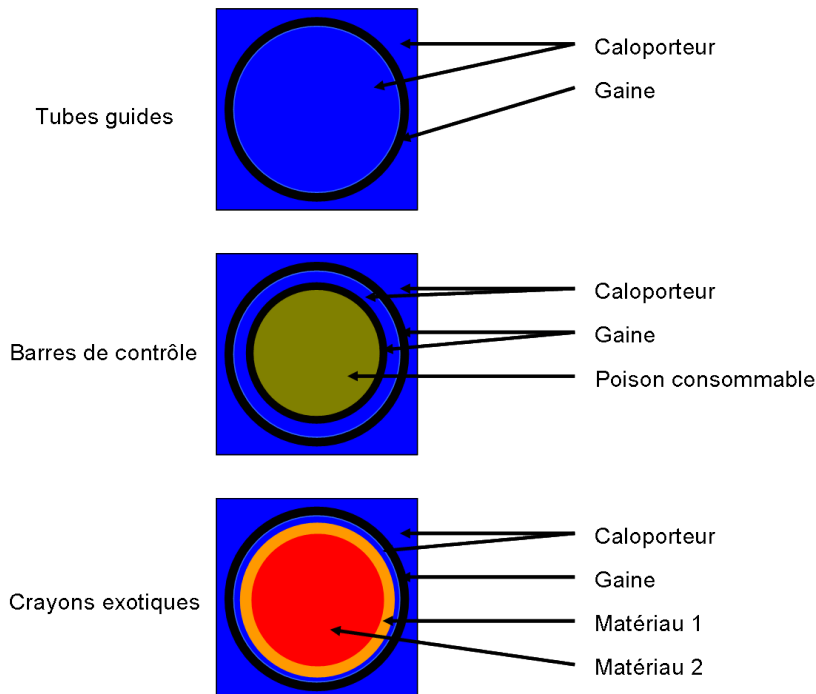


FIG. 3.5: Illustration des cellules élémentaire pré-définies



Le placement de chaque crayon peut être réalisé automatiquement ou dans le cas de géométries complexes chaque structure (différente de celles déjà pavées) est placée manuellement. Par exemple, pour les tubes guide, après une déclaration de dimensions et de matériaux comme présenté ci-dessus, l'utilisateur déclare pour cette nouvelle structure les dimensions s'y rapportant, tout comme les matériaux la composant. Ensuite, il place un à un les tubes par l'emploi d'une méthode ne requérant que la position relative de la structure dans l'assemblage (dans un repère cartésien). Par exemple pour une structure au centre de l'assemblage, la position sera (0,0). Il en va de même pour toutes les structures implémentées dans la classe ReactorMesh.

Pour la réalisation de géométries complexes, la démarche reste très descriptive, ce qui apporte deux avantages :

- une simplicité d'utilisation qui assure la rapidité de création d'une géométrie,
- et en conséquence une très faible source d'erreur.

Comme pour les autres structures, le découpage axial est réalisé automatiquement à l'appel d'une seule fonction en début de fichier d'entrée MURE. Pour ce qui est de la différenciation radiale, à savoir créer des zones pour lesquelles toutes les grandeurs physiques seront traitées indépendamment<sup>10</sup>, soit c'est réalisé automatiquement par zones cylindriques, soit l'utilisateur spécifie au moment de placer les structures dans quelle zone celles-ci doivent figurer (cf. figure 3.6, chaque code de couleur représente une zone).

### 3.3.2 Thermohydraulique

En ce qui concerne l'utilisateur, le fait de réaliser une étude couplée à la thermohydraulique ne demande aucune action supplémentaire. Seuls quelques paramètres de fonctionnement sont requis :

- le température d'entrée,
- le débit massique,
- la pression en sortie
- et en ce qui concerne les options facultatives on peut citer la présence et le positionnement des grilles, ou la concentration de bore.

Ces données restent des paramètres factuels, l'intérêt est d'ailleurs de les faire varier afin de tester la viabilité d'un concept.

Nombre de calculs sont effectués automatiquement afin de pouvoir réaliser les études de thermohydraulique. Les principaux sont :

- le recouvrement des maillages entre les géométries (la modélisation sous COBRA se différencie nettement des modélisations en neutronique, cf. figure 3.7),
- le calcul du nombre de crayons, tubes-guides et sous-canaux,
- la récupération des valeurs de dépôts de puissance pour chaque crayon (cf. section 3.4.1),

---

<sup>10</sup>A l'identique de chaque niveau axial, chaque zone radiale est traitée indépendamment l'une de l'autre, ce qui permet par exemple de faire évoluer le combustible de manière hétérogène, ou d'avoir un couplage avec la thermohydraulique aussi fin que nécessaire.

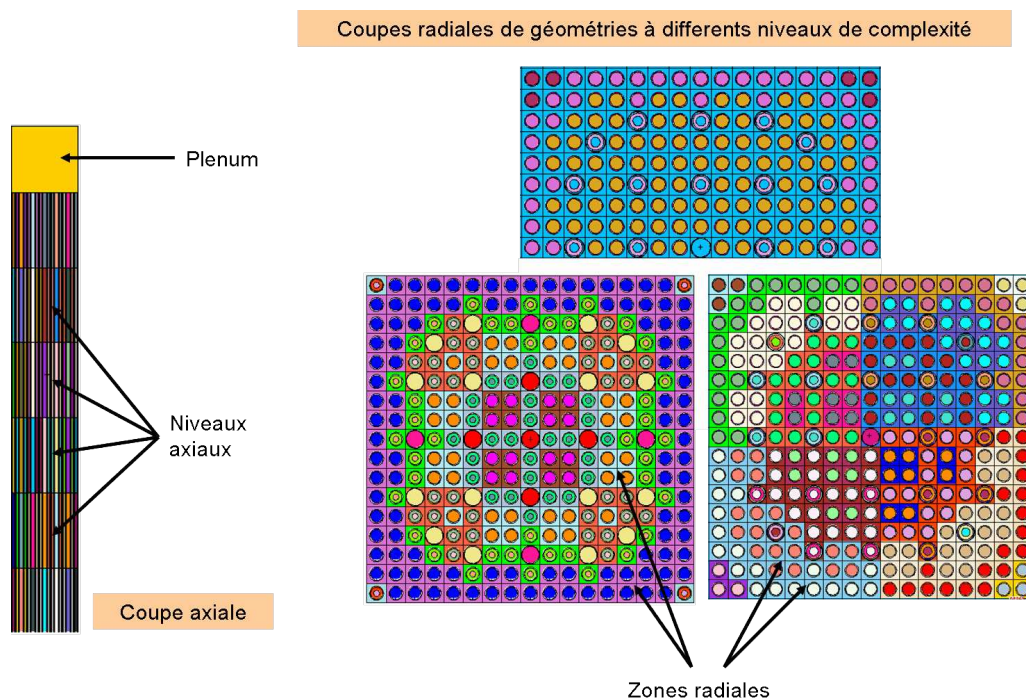


FIG. 3.6: Illustrations de géométries

- l'identification des canaux et crayons ainsi que les connexions entre les différents canaux (cf. figure 3.7),
- la section de passage entre chaque sous-canal et les sous-canaux adjacents (qui varie suivant les dimensions des crayons, si un tube guide ou une autre structure est présente),
- les volumes de contrôle dans lesquels chaque crayon dissipe son énergie,
- l'aire de passage, le périmètre mouillé et chauffant de chaque sous-canal,
- les dimensions de pastille combustible, lame de gaz et épaisseur de gaine pour chaque crayon,
- le regroupement des sous-canaux structurellement identiques sous une même catégorie<sup>11</sup>, ...

### 3.4 Communication entre les disciplines

Les codes de neutronique et de thermohydraulique doivent échanger des données. La voie que nous avons choisie étant de réutiliser des codes existants et de les coupler, deux méthodologies sont possibles :

- le couplage interne (qui consiste à modifier les sources des codes afin d'avoir des variables partagées),

<sup>11</sup>Imposé par le code COBRA.

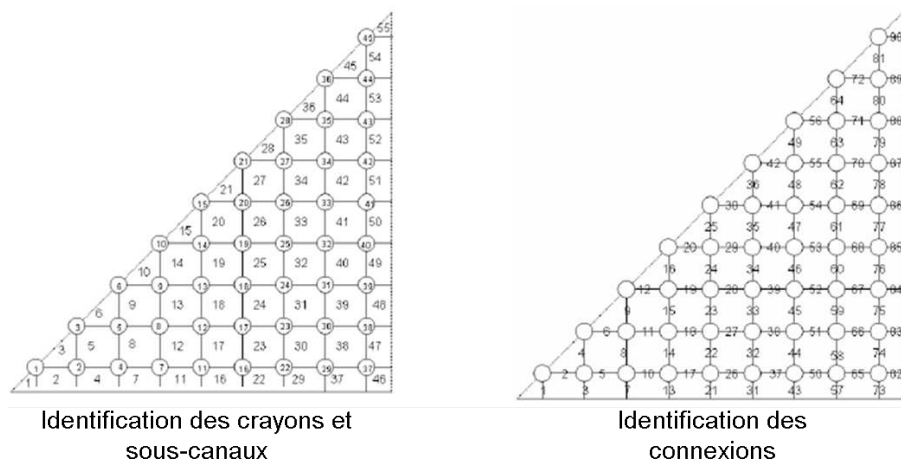


FIG. 3.7: Modélisation géométrique sous COBRA

- le couplage externe (qui revient à conserver en l'état les codes existants, ce qui implique une communication par échanges de données en externe).

L'avantage du couplage externe réside dans le fait que lorsque les codes sont améliorés par leurs développeurs et mis à disposition de la communauté, ils restent compatibles avec le travail sur le couplage déjà réalisé. Ce qui apporte une pérennité au système. C'est donc en toute logique que cette voie a été suivie<sup>12</sup>.

Cependant elle implique quelques réserves. Le couplage n'est donc pas un couplage fort : le séquençage linéaire des codes est incontournable. L'ordonnancement des calculs est donc le suivant : les codes s'enchaînent en échangeant des données à chaque fin de calcul d'un des deux codes. Les résultats de l'un sont exploités afin de redéfinir les paramètres initiaux de calcul de l'autre (cf. figure 3.8). Un inconvénient à cette méthode est la grande quantité de données qu'ils doivent échanger. C'est la raison pour laquelle, tout a été automatisé, de la conception de la géométrie à l'exécution des codes, en passant par les échanges de données.

### 3.4.1 Communications de la neutronique vers la thermohydraulique

A partir d'une distribution de températures dans le système simulé<sup>13</sup>, la neutronique (MCNP) détermine un profil de flux (tallies F4). MURE calcule ensuite les taux de réactions et détermine ainsi la distribution de puissance en trois dimensions. Pour chaque cellule, ou groupement de cellules (combinaison de zone radiale / niveau axial), une valeur de puissance totale est associée. Disposant des informations nécessaires sur les dimensions des structures, le calcul des équivalences en puissance linéique est réalisé.

<sup>12</sup>Rappelons que de toutes façons le CNRS ne dispose pas des droits de distribution des codes MCNP et COBRA.

<sup>13</sup>Nous nous limitons dans cette partie de discuter uniquement des grandeurs échangées à savoir des températures, masses volumiques et puissances.

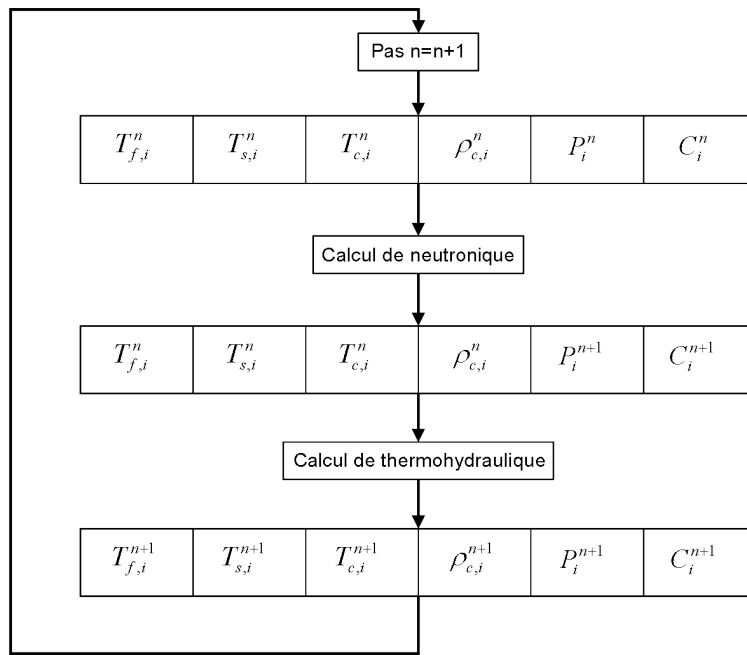


FIG. 3.8: Ordonnancement des calculs : avec  $T_f$  la température du combustible,  $T_s$  la température de la structure,  $T_c$  la température du caloporteur,  $P$  la puissance locale déposée,  $C$  la concentration de Bore, l'indice  $n$  le pas du calcul, l'indice  $i$  la  $i$ ème cellule

En effet le code COBRA est en attente de valeurs de puissance linéique, mais pour chaque crayon. Si la simulation neutronique est une modélisation crayon par crayon, alors le transfert d'information est direct. Si par contre la neutronique a nécessité un regroupement, comme c'est généralement le cas pour des simulations à l'échelle de plusieurs dizaines d'assemblages, alors chaque crayon d'une même zone se verra attribuer le même dépôt de puissance. C'est l'approximation du flux plat pour les éléments en question (rappelons que dans une même zone tous les crayons sont identiques<sup>14</sup>). D'où la nécessité de s'assurer de la cohérence des choix de regroupement. Généralement, celui-ci ne s'applique que sur des cellules voisines pour lesquelles le flux est très similaire.

### 3.4.2 Communications de la thermohydraulique vers la neutronique

A partir de cette nouvelle carte des dépôts de puissance, COBRA peut calculer la distribution des températures correspondante. Ces résultats sont bien plus fins que dans la simulation neutronique : plusieurs noeuds de calcul sont présents au sein d'une même cellule. Les résultats récupérés dans le fichier de sortie ne sont pas exploitables directement, des moyennes doivent être réalisées. De plus, si plusieurs cellules sont regroupées au niveau neutronique, une seconde moyenne doit être faite.

<sup>14</sup>La numérotation des zones est entièrement arbitraire, elles ne sont en rien liées à un positionnement dans l'espace, elles permettent simplement d'alléger un calcul.

Par exemple pour des cellules indicées  $i$  devant être identiques pour la neutronique, la température ou la masse volumique allouée à la zone / niveau correspondant est la moyenne de toutes les cellules qui la composent. Cependant, par exemple pour le caloporteur, les volumes à “mélanger” n’étant pas obligatoirement les mêmes (présence de tubes-guides par exemple réduisant de ce fait la section de passage, dû au diamètre plus important de la gaine), nous raisonnerons sur des quantités d’énergie, prenant donc en compte les quantités de matière et non pas des grandeurs intensives comme la température.

Pour cela, nous considérons l’ensemble des cellules à “mélanger” comme un système thermodynamiquement isolé, qui n’échange donc aucune énergie avec le milieu extérieur. Le système est adiabatique, ce qui implique  $\sum_i Q_i = 0$  (avec  $Q_i$  l’énergie contenue dans la cellule  $i$ ). Nous ne considérons pas non plus de changement d’état de la matière ou de réactions thermiques.

Ainsi :

$$\begin{cases} Q_i = m_i C_{p_i} (T_{eq} - T_i) \\ \text{soit pour le mélange : } \sum_i m_i C_{p_i} (T_{eq} - T_i) = 0 \end{cases} \quad (3.21)$$

Avec  $m$  la masse ( $kg$ ) et  $C_p$  la capacité calorifique massique ( $J/kg/K$ ),  $T_{eq}$  la température dite d’équilibre du système ( $K$ ) s’exprime telle que :

$$T_{eq} = \frac{\sum_i m_i C_{p_i} T_i}{\sum_i m_i C_{p_i}} \quad (3.22)$$

De même pour la masse volumique du système  $\rho_{eq}$  ( $kg/m^3$ ) on assure la conservation des masses :

$$\rho_{eq} = \frac{\sum_i \rho_i V_i}{\sum_i V_i} \quad (3.23)$$

Toutes ces données une fois formatées pour la modélisation neutronique, sont utilisées comme données d’entrée pour le calcul MCNP suivant. Ceci implique une contrainte supplémentaire : disposer de sections efficaces en fonction de la température pour tous les matériaux présents dans le système.

### 3.5 Gestion des sections efficaces en fonction de la température

Les capacités des méthodes développées permettent des modélisations en trois dimensions pour un système couplé entre la neutronique et la thermohydraulique. Afin d’être cohérent avec ce degré de précision, les sections efficaces utilisées pour les calculs d’interaction neutron-matière en neutronique doivent être finement interpolées. Ce qui permettra la prise en compte des effets Doppler avec un degré de finesse du même ordre que celui utilisé pour les découpages spatiaux. En thermohydraulique, les résultats permettent d’avoir des profils de température continus. Cependant, pour la partie neutronique, ces profils sont

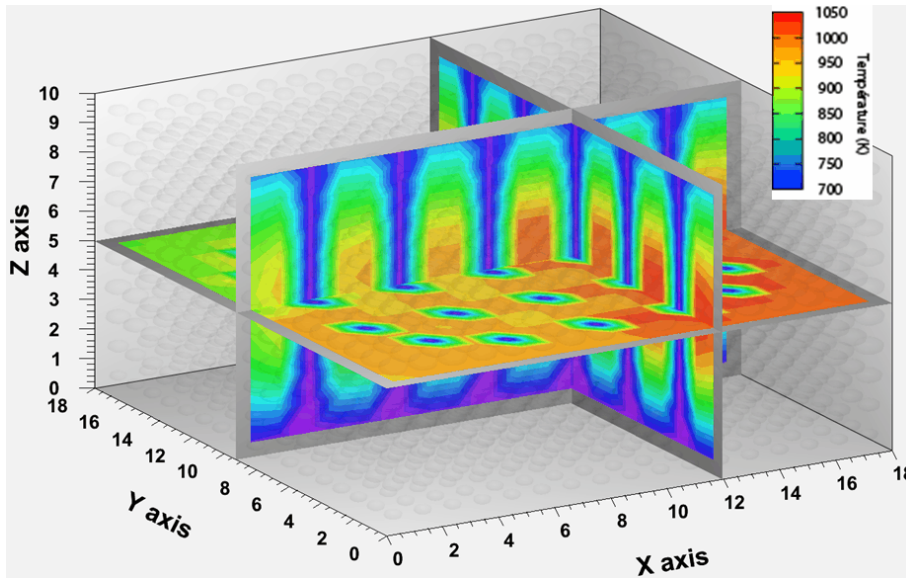


FIG. 3.9: Illustration de résultat d'un calcul couplé avec COBRA - zoom sur un assemblage arbitraire du cœur

pris en compte, si et seulement si, les sections efficaces sont disponibles aux températures correspondantes. Rappelons que dans un calcul couplé, les contre réactions thermiques sont principalement dues aux changements de masse volumique de la matière<sup>15</sup> et à l'impact des températures sur les sections efficaces.

Il existe différentes méthodes pour générer des sections efficaces en fonction de la température :

- une interpolation à partir de deux sections efficaces disponibles à des températures qui encadrent la valeur souhaitée,
- la génération de nouvelles sections efficaces à différentes températures avec un pas arbitraire.

Ces deux méthodes ont chacune leurs avantages et inconvénients. Pour la première, l'avantage est d'avoir des données discrètes, mais en contrepartie les temps de calculs sont augmentés en raison du recours aux pseudo-matériaux (cf. section 3.5.3). En ce qui concerne la seconde, l'inconvénient majeur est le fait que la précision dépend de la richesse des tables générées.

### 3.5.1 Traitement de la dépendance en température des sections efficaces par l'outil NJOY

C'est la méthode la plus directe, ne requérant qu'une unique démarche préalable : générer toutes les sections efficaces des différents isotopes présents dans les bases de données aux températures souhaitées. Dans un souci d'économie en espace disque, nous avons

<sup>15</sup>Plus particulièrement du caloporteur.

procédé à la génération des sections efficaces en fonction de la température pour les noyaux suivants :

- les actinides tous les 100 degrés, ainsi que l’oxygène, le sodium et l’hydrogène,
- et tous les 300 degrés pour les autres noyaux.

Toutes ces sections efficaces ont été générées grâce à l’outil ENDF2ACE[57] (inclu dans MURE) qui gère le code NJOY<sup>16</sup>. NJOY[58] est un code de travail lié à l’évaluation des données nucléaires, et en ceci il est très spécifique et délicat à mettre en oeuvre. C’est dans ce contexte que le code ENDF2ACE a été développé afin de faciliter la manipulation des fonctionnalités de NJOY pour les non spécialistes. Cette interface permet plus aisément la transformation d’un format de données ENDF au format ACE (en fichiers binaires ou ASCII) exploitables par MCNP. Cet outil nous a permis en particulier de générer les 400 noyaux de la base ENDFB7<sup>17</sup> à plus de 2000 températures différentes (ce qui représente environ 5Go de données pour les seuls fichiers binaires).

N.B. : MURE gère également automatiquement la construction du fichier XSDIR dans lequel sont répertoriés tous les chemins des fichiers ACE nécessaires à la simulation.

### 3.5.2 Cas particulier des tables $S(\alpha, \beta)$

Les structures cristallines et les liaisons moléculaires jouent un rôle important dans la thermalisation des neutrons. Leurs propriétés chimiques déterminent les arrangements atomiques et moléculaires. Au sein des réacteurs nucléaires, de telles molécules sont présentes comme l’eau ou le graphite, et leurs interactions avec la matière ne peuvent être quantifiées par les seules réactions des neutrons sur les noyaux. A l’échelle de la molécule, les réactions de diffusions des neutrons ne sont pas négligeables (par exemple, des écarts sur le coefficient de multiplication de l’ordre de 1000 pcm<sup>18</sup> sont à envisager si ces tables ne sont pas utilisées). Ces effets sont pris en compte au cours d’une simulation par l’utilisation d’un traitement  $S(\alpha, \beta)$  pour les neutrons thermiques. Dans le cas de la simulation de réacteurs à eau par exemple, ce sont les matrices  $S(\alpha, \beta)$  pour l’hydrogène dans l’eau qu’il faut utiliser.

De la même manière que pour les sections efficaces des noyaux, ces tables doivent être générées à différentes températures. Plusieurs méthodes sont également envisageables :

- utiliser les matrices  $S(\alpha, \beta)$  déjà présentes dans les évaluations, et réaliser des interpolations,
- générer les matrices  $S(\alpha, \beta)$  à des températures plus régulièrement espacées et interpoler si nécessaire,
- ou générer les matrices  $S(\alpha, \beta)$  à des températures très rapprochées et les utiliser directement sans interpolation.

Dans le manuel d’utilisation de ENDF les méthodes d’interpolation des données  $S(\alpha, \beta)$  sont décrites pour chacun des deux cas. Cependant, des études de criticité ont montré

<sup>16</sup>Version de NJOY employée : NJOY\_99 avec la mise à jour 259.

<sup>17</sup>Les bibliothèques de sections efficaces des bases JEFF-3.1, JENDL-3.3 et ENDFB-6.8 ont également été générées.

<sup>18</sup>PCM : Pour Cent Mille.

les limites de cette méthode[59]. D'après leurs conclusions, l'interpolation sur les tables  $S(\alpha, \beta)$  est très délicat et conduit souvent à la production de probabilités d'interaction erronées.

Dans ce contexte, la génération de tables  $S(\alpha, \beta)$  à des températures très rapprochées avec l'outil NJOY a été retenu. Ses modules THERM et LEAPR permettent de générer des données aux températures souhaitées à l'aide différents modèles de vibrations moléculaires et de gaz libres.

Ces tables ont été générées dans un premier temps tous les 10 degrés entre 500 K et 700 K.

### 3.5.3 Traitement de la dépendance en température des sections efficaces par une méthode d'interpolation

Une méthode de pondération a été mise en place permettant de déterminer une valeur de probabilité d'interaction à partir de données disponibles à d'autres températures que celle souhaitée. Cette méthode permet ainsi d'utiliser les bases de sections efficaces disponibles[60]. La pondération effectuée est la suivante :

$$\Sigma(T) = \omega_1 \Sigma(T_1) + \omega_2 \Sigma(T_2) \quad (3.24)$$

avec :

$$\omega_2 = \frac{\sqrt{T} - \sqrt{T_1}}{\sqrt{T_2} - \sqrt{T_1}} \quad \text{et} \quad \omega_1 = 1 - \omega_2 \quad (3.25)$$

Avec :

- $T$  la température souhaitée (K),
- $T_1$  la température de la section efficace telle que  $T_1 < T$  (K),
- $T_2$  la température de la section efficace telle que  $T_2 > T$  (K),
- $\omega_1$  et  $\omega_2$  les facteurs de pondération.

Ces valeurs de pondération sont ensuite utilisées comme poids d'importance dans les pseudo-matériaux. En fait, le matériau original à la température  $T$  est remplacé par un mélange de deux matériaux identiques aux températures  $T_1$  et  $T_2$  dont les fractions atomiques sont définies par les poids, respectivement  $\omega_1$  et  $\omega_2$ . Ce sont ces matériaux qui sont qualifiés de pseudo-matériaux.

Un inconvénient majeur à cette méthode est le doublement du nombre de matériaux dans la simulation, ce qui augmente les temps de calcul. Néanmoins cette méthode a été implémentée et testée avec la possibilité de choisir quels matériaux ou quels noyaux d'un matériaux doivent faire l'objet d'une interpolation sur les sections efficaces. Les autres noyaux ou matériaux demeurent sur une procédure standard gérée également par MURE, qui consiste à rechercher dans les bibliothèques de sections efficaces celle correspondant à la température la plus proche de la température souhaitée. Cette possibilité de sélection présente l'avantage de ne sélectionner que les matériaux ou noyaux jouant un rôle prépondérant, et ainsi limiter l'augmentation du temps de calcul sans pour autant altérer la qualité des résultats.



### Quantification de l'intérêt de la méthode des pseudo-matériaux

Une simulation sur un assemblage de réacteur à eau bouillante (REB) a été réalisée. Le choix de ce type de réacteur à très fort gradient de flux se justifie pour différentes raisons. Premièrement, comme d'autres systèmes, il présente des disparités de température suffisamment importante afin de pouvoir quantifier l'intérêt d'une méthode par rapport à une autre. Deuxièmement, les temps de stabilisation des calculs au cours des itérations successives (appelée convergence) sont très longs par rapport à des calculs d'assemblage REP ou RNR sodium<sup>19</sup>. Ainsi nous pourrions observer ou non l'intérêt de l'emploi de la méthode des pseudo-matériaux sur la vitesse de convergence dans un cas non favorable. Et enfin, compte tenu de ses spécificités, le caloporteur présente des écarts en température très faibles, car l'eau change d'état dès les premières mailles (la température reste à la température de saturation). Ainsi seule la masse volumique de l'eau varie, ce qui permet de supprimer l'impact des tables  $S(\alpha, \beta)$  sur les résultats de simulation pour lesquelles l'interpolation n'est pas possible (cf. section 3.5.2).

Trois méthodes de gestion des sections efficaces ont été employées :

- un cas dit de référence sans pseudo-matériaux<sup>20</sup>,
- un cas avec l'utilisation des pseudo-matériaux pour les noyaux du combustible (combustible UOX neuf),
- un cas avec l'utilisation des pseudo-matériaux pour tous les noyaux présents dans le système<sup>21</sup>.

**Impact sur les temps de calcul** Le calcul couplé comprend 20 itérations neutronique thermohydraulique nécessaires à l'obtention d'un résultat stable en terme de variations des grandeurs physiques par cellule (puissance déposée par cellule, températures, ...). L'assemblage est découpé en 30 mailles axiales équidistantes, avec une statistique de 200.000 particules par cycle et 100 cycles, ce qui correspond à environ 6.000 particules par tranche et par cycle. Cette statistique permet de minimiser l'écart type sur les dépôts de puissance (déterminée à partir des tallies F4 de MCNP) à quelques pourcent.

Méthode de calcul	temps de calcul	écart sur les temps de calcul
Référence	18 h	/
Pseudo-matériaux (combustible)	20 h	+ 11 %
Pseudo-matériaux (tous les noyaux)	30,5 h	+ 69 %

TAB. 3.1: Temps de calcul par méthode

Le premier impact de l'utilisation de cette méthode est l'augmentation plus ou moins

<sup>19</sup>Respectivement Réacteur à Eau sous Pression, et Réacteur à Neutrons Rapides refroidi au sodium liquide.

<sup>20</sup>Avec des sections efficaces disponibles tous les 100 degrés pour les actinides, et tous les 300 degrés pour les autres noyaux (cf. section 3.5.1).

<sup>21</sup>Cette interpolation n'est pas effectuée sur les tables  $S(\alpha, \beta)$  (cf. section 3.5.2).

significative du temps de calcul suivant comment est appliquée cette méthode (cf. tableau 3.1). L'utilisation de la méthode des pseudo-matériaux sur les noyaux d' $^{235}\text{U}$  et d' $^{238}\text{U}$  augmente légèrement les temps de calcul, alors que si tous les noyaux présents dans la simulation sont dupliqués, les temps de calcul augmentent très significativement et peuvent devenir prohibitifs suivant la complexité de la géométrie. Reste à déterminer dans quelle mesure l'augmentation du temps de calcul devient acceptable au regard de l'amélioration de la rapidité de convergence et/ou de l'amélioration des résultats.

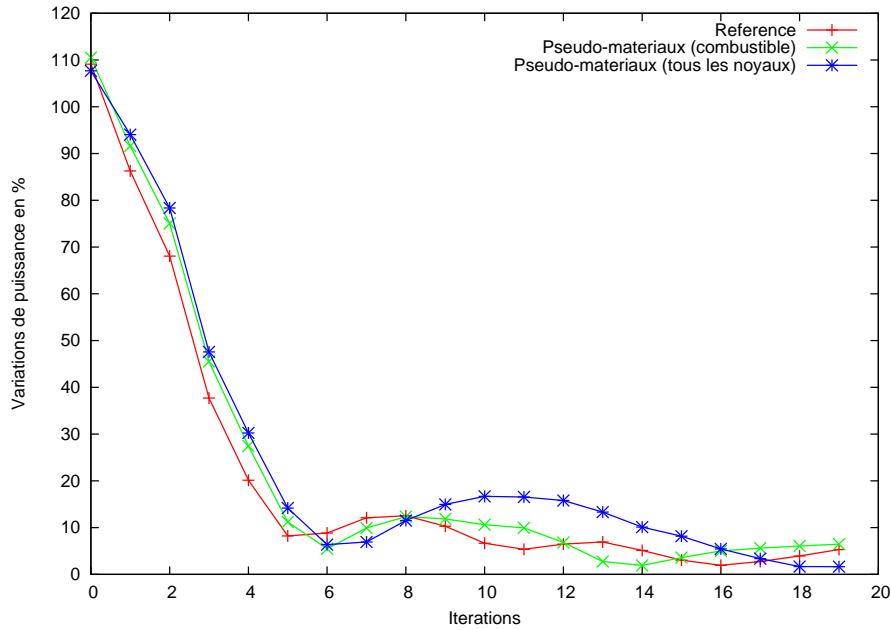


FIG. 3.10: Mesure de la rapidité de convergence suivant la méthode employée : la variation de puissance correspond à  $V = \frac{\sum_k |P_{i,k} - P_{i-1,k}|}{P_{totale}}$ , avec l'indice  $k$  représentant la  $k$ ème cellule, l'indice  $i$  la  $i$ ème itération,  $P$  la puissance déposée dans la cellule  $k$ .

**Impact sur la rapidité d'obtention d'un calcul convergé (cf. figure 3.10)** L'atteinte de la convergence est un paramètre arbitraire. L'utilisateur définit ses propres critères de convergence qui peuvent être globaux (stabilité moyenne par groupe de cellules<sup>22</sup>) ou locaux (vérification de la stabilité des résultats au cours des itérations cellule par cellule). C'est cette dernière voie que nous avons choisie et pour laquelle la statistique dans les calculs Monte Carlo est déterminante (cf. section 3.6). Ainsi au cours des itérations, les écarts cellule par cellule sur les valeurs de dépôts de puissance sont sommés.

On peut observer qu'au bout de la sixième itération un palier est franchi. Les écarts s'atténuent pour laisser place à ce qu'on peut être tenté de qualifier de fluctuations. Les mesures de convergence sur le calcul dit de référence sont comparables à ceux sur le calcul

<sup>22</sup>C'est la convergence du groupe qui est observée et non pas chaque cellule indépendamment l'une de l'autre.

utilisant la méthode des pseudo-matériaux pour le combustible. Alors que la convergence que l'on observe sur le calcul avec la méthode des pseudo-matériaux pour tous les noyaux diffère. Ceci s'explique par le fait que les noyaux combustibles disposent de sections efficaces en fonction de la température étalonnées tous les 100 degrés. Ainsi pour la méthode de référence et la méthode des pseudo-matériaux appliquée au combustible, les sections efficaces utilisées sont très similaires. A l'inverse de la méthode des pseudo-matériaux appliquée à tous les noyaux. Rappelons que la méthode de référence utilise une librairie de sections efficaces dans laquelle les noyaux autres que les actinides ne sont disponibles que tous les 300 degrés.

Pour les deux premières méthodes, cet aspect implique la présence de fluctuations. Pour cette simulation en particulier, la convergence telle qu'elle a été définie ne peut être meilleure que 5%. En effet, imaginons un noyau à une température intermédiaire entre deux températures de sections efficaces disponibles. MURE détermine la section efficace la mieux adaptée comme étant celle dont la température associée est la plus proche de la température souhaitée. Ainsi à chaque itération, de légères variations de température, même de quelques degrés, suffisent à provoquer une alternance entre ces deux sections efficaces. Cet effet contribue aux fluctuations observées.

La convergence pour la méthode des pseudo-matériaux pour tous les noyaux suit la même tendance que celle des deux autres méthodes jusqu'à la huitième itération. Après quoi, on observe une détérioration non négligeable de la stabilité des résultats (les écarts étant bien supérieurs à ceux qui auraient pu être induits aux incertitudes sur la détermination du flux par MNCP - l'écart type est de l'ordre de quelques pourcent dans ces conditions de simulation). Étant donné que pour tous les calculs on observe un rebond entre la sixième et la huitième itération, cette bosse pourrait s'expliquer par le fait que l'interpolation sur les sections efficaces apportant un effet continu, les contre réactions thermiques sont plus douces que celles que l'on peut observer dans les autres cas. La conséquence à cela est une forte atténuation des fluctuations, mais en contre partie une atteinte de la convergence qui peut être plus longue après une perturbation (par exemple statistique). Par contre, les critères de convergence peuvent être durcis avec cette méthode (la somme des écarts sur les valeurs de dépôts de puissance sur les cellules est inférieure à 2%).

**Impact sur la qualité de la convergence (cf. figure 3.11)** Les valeurs maximales d'écarts entre deux itérations suivent la même tendance que l'évolution globale de la convergence. On remarque d'ailleurs que la méthode des pseudo-matériaux appliquée à tous les noyaux impose le même type de rebond après la huitième itération. Cet indicateur permet de vérifier la valeur la plus "défavorable" lors d'un arrêt des calculs itérés de par la validation des critères de convergence. Ceci dit, cet indicateur ne prend pas en compte l'importance de la fluctuation en question. En effet, et dans ce cas très particulier des réacteurs à eau bouillante présentant de forts gradients de flux, les cellules mises en évidence par cet indicateur sont celles dans lesquelles le flux est minimal. Ce sont les cellules qui se trouvent aux extrémités hautes de l'assemblage et pour lesquelles les

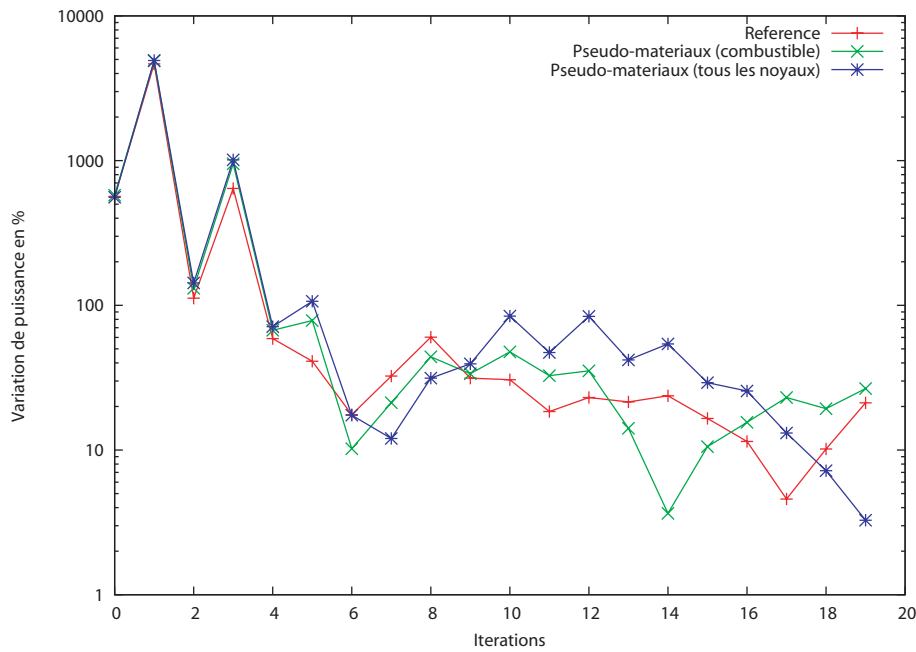


FIG. 3.11: Mesure de la variation maximale sur les dépôts de puissance en fonction de l'itération : La variation de puissance maximale correspond à  $V_{max} = \max_k \left( \frac{|P_{i,k} - P_{i-1,k}|}{\frac{P_{i,k} + P_{i-1,k}}{2}} \right)$ , avec l'indice  $k$  représentant la  $k$ ème cellule, l'indice  $i$  la  $i$ ème itération,  $P$  la puissance déposée dans la cellule  $k$ .

taux de fission sont très inférieurs aux cellules basses, dont les neutrons les traversant, sont bien mieux modérés du fait de la masse volumique plus élevée du caloporteur. Elles subissent donc un dépôt de puissance d'un ordre de grandeur au dessous des cellules basses du réacteur. Cependant, la masse volumique de l'eau en haut de l'assemblage est dépendante des taux de réaction tout au long de la colonne, et subit donc, aux cours des ajustements neutronique thermohydraulique, de fortes fluctuations ; le ralentissement des neutrons étant très sensible aux variations de masse volumique. En conséquence, cet indicateur n'a pas de réel sens physique, mais il reflète plutôt une convergence numérique. Il n'entre donc pas en jeu dans la décision d'arrêt des itérations, mais demeure l'objet d'attentions de l'utilisateur a posteriori du calcul.

Ce qui ressort une nouvelle fois de l'observation de ce paramètre, c'est le peu d'intérêt d'utiliser la méthode des pseudo-matériaux sur le combustible par rapport à l'utilisation brute des sections efficaces échelonnée tous les 100 degrés pour les actinides. Par contre il en ressort pour ce cas précis de simulation, la nécessité d'avoir des sections efficaces beaucoup plus finement générées en température que tous les 300 degrés actuels pour les autres noyaux (hors actinides). Chose qui n'était pas évidente a priori, l'impact des variations de températures sur les matériaux de structure (gainés) semblait être bien moins important que ce qu'il n'est réellement.

Mais un problème persiste. Si l'on souhaite générer les sections efficaces des noyaux

composant les matériaux des gaines à des températures plus rapprochées, un pas de cent degrés comme pour les actinides est insuffisant. En effet l'échauffement des structures reste faible : elles varient en moyenne entre 560 K et 630 K. Ce qui obligerait pour être cohérent à les générer tous les 25 K, augmentant significativement la taille des fichiers de sections efficaces occupée sur les disques<sup>23</sup>.

Cependant, comme nous l'avons signalé en début de paragraphe, cet indicateur est bien plus numérique que ce qu'il est physique : observons plus attentivement les conséquences purement physiques de ces deux méthodes en se concentrant sur les grandeurs utilisables.

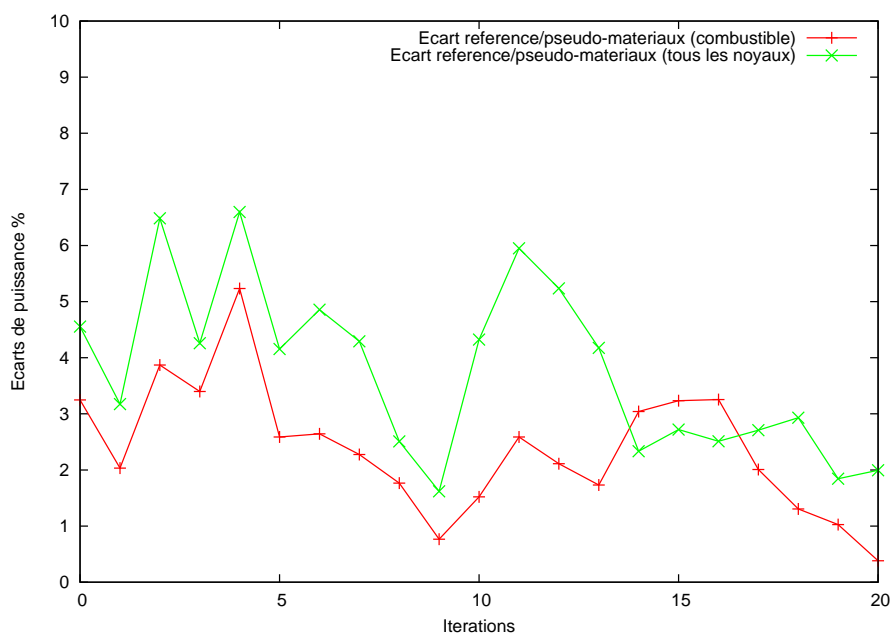


FIG. 3.12: Mesure des écarts des dépôts de puissance entre les deux méthodes de calcul : les écarts de dépôts de puissance pour chaque itération entre le calcul dit de référence et la méthode des pseudo-matériaux est défini ainsi  $E = \frac{\sum_k |P_{ref} - P_{pseudo-matériaux}|}{P_{totale}}$ , avec l'indice  $k$  représentant la  $k$ ème cellule, l'indice  $i$  la  $i$ ème itération,  $P$  la puissance déposée dans la cellule  $k$ .

**Amélioration des résultats (cf. figure 3.12)** Au final, après un test de convergence assurant l'utilisateur d'une solution de son schéma numérique, les grandeurs physiques utilisables demeurent les valeurs de dépôt de puissance, de températures et de masses volumiques. Observons donc les résultats présentés dans la figure 3.12. Malgré toutes les divergences sur les notions de qualité de convergence, quand on se concentre sur les résultats utilisables, on s'aperçoit que toutes ces méthodes de calculs fournissent des résultats comparables. L'utilisation d'une méthode se basant sur une librairie de sections efficaces

<sup>23</sup>Comme pour tout ce qui a trait au couplage, l'aspect informatique occupe une place importante dans les choix réalisés.

générées à des températures espacées d'une centaine de degrés fournit des résultats analogues à ceux d'une méthode de pseudo-matériaux appliquée à tous les noyaux du système. La somme des écarts de dépôt de puissance dans chaque cellule entre ces deux méthodes est inférieure à 3% de la puissance du système. C'est à dire du même ordre de grandeur que les incertitudes statistiques sur le flux.

**Intérêt des pseudo-matériaux** En définitive, les méthodes utilisant les pseudo-matériaux permettent la réalisation d'études couplées neutronique thermohydraulique avec une librairie de section efficaces modeste en terme de dépendance en température. Un pas de plusieurs centaines de degrés pourrait suffire. Le seul problème, pour peu que la méthode complète soit automatisée<sup>24</sup>, demeure l'augmentation significative des temps de calculs. Cependant, tout dépend de la géométrie simulée. Dans le cadre de simulations de quelques assemblages la méthode reste viable. Mais pour des simulations de cœur de réacteur en trois dimensions et un maillage fin, cette méthode n'est pas recommandée.

Une autre application dans laquelle cette méthode prendrait tout son sens serait pour des études de calculs cinétique avec MCNP où les variations de réactivités seraient directement récupérées du calcul du facteur de multiplication. Dans ce cas, chaque petite variation de température serait correctement prise en compte, à la différence de calculs à seuil imposé par la fréquence de disponibilité en température des sections efficaces. Cependant, dans ce cas également, les temps de calculs seraient importants.

### 3.6 Recherche de la convergence et difficultés associées

L'approche de l'étude faite ici de la convergence est empirique alors que celle-ci nécessiterait une étude rigoureuse qui n'a pas été développée dans le présent travail. Ainsi, lorsque les grandeurs physiques d'une itération à l'autre présentent un écart minimum acceptable, alors le calcul est dit convergé. Le choix du niveau de convergence est laissé à l'utilisateur. En effet, suivant la statistique sélectionnée, le maillage spatial effectué, et la rapidité souhaitée d'obtention des résultats, le critère de convergence varie. Nous avons observé au cours de nos simulations un maximum requis pour la convergence d'environ une dizaine d'itérations pour les simulations les plus complexes. Ces simulations ont été réalisées avec une statistique importante (exemple : entre 500 000 et un million de particules dans le cas d'un cœur REP), et le calcul est dit convergé lorsque les fluctuations sont inférieures à celles induites par l'erreur statistique<sup>25</sup>.

Dès les premiers tests de calculs couplés neutronique thermohydraulique, même sur des cas simples (assemblage homogène, mais bien entendu découpé axialement) les résultats ne convergeaient jamais (cf. figure 3.13). Les fluctuations sur toutes les valeurs neutroniques (flux, et directement lié : les dépôts de puissance) étaient presque aussi importantes au cours des premières itérations que dans les dernières.

---

<sup>24</sup>Ce qui est le cas dans MURE.

<sup>25</sup>Les vérifications de la convergence des calculs seront présentées avec les résultats des différentes simulations, cf. chapitre suivant

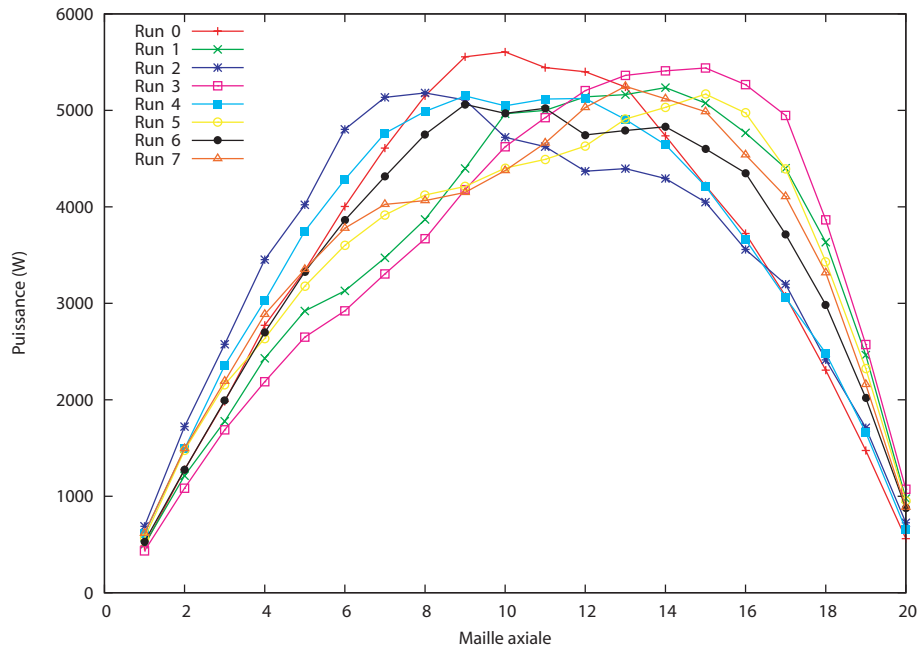


FIG. 3.13: Profil de puissance axial en fonction des itérations

Ces problèmes avaient déjà été identifiés pour les systèmes à rapport de dominance élevé (très grand système tel que le REP)[61, 62, 63]. Car en définitive, la cause majeure de ces fluctuations n'est pas liée au schéma couplé. Nous avons donc mis de côté le couplage avec la thermohydraulique et réalisé des études neutroniques sur des maillages en espace similaires à ceux requis pour un calcul couplé : découpage d'un assemblage REP en une dizaine de niveaux axiaux et quelques zones radiales.

### 3.6.1 Observations préliminaires

La première des démarches a été de vérifier l'hypothèse que les fluctuations de flux étaient effectivement principalement dû au code MCNP. Ainsi, nous avons très rapidement établi que le problème sur la convergence était principalement lié à la partie neutronique, et donc à des fluctuations statistiques importantes. En effet, en modifiant le germe de nombre aléatoires initial pour le calcul Monte Carlo<sup>26</sup> (cf. figure 3.14), les profils de flux axiaux présentaient de très fortes variations malgré la statistique employée (de l'ordre de quelques centaines de particules par cellule). Cet aspect n'avait jamais été observé auparavant dans notre groupe dans le sens où des calculs en trois dimensions aussi fins n'avaient pas encore été initiés.

Compte tenu de la statistique, il semblait que l'effet soit plutôt un problème de stabilisation des sources de fission. Dans un cas de réflexion totale sur les parois de l'assemblage (le flux doit être plat axialement), nous avons donc réalisé deux simulations incluant une

<sup>26</sup>Défini dans la carte DBCN.

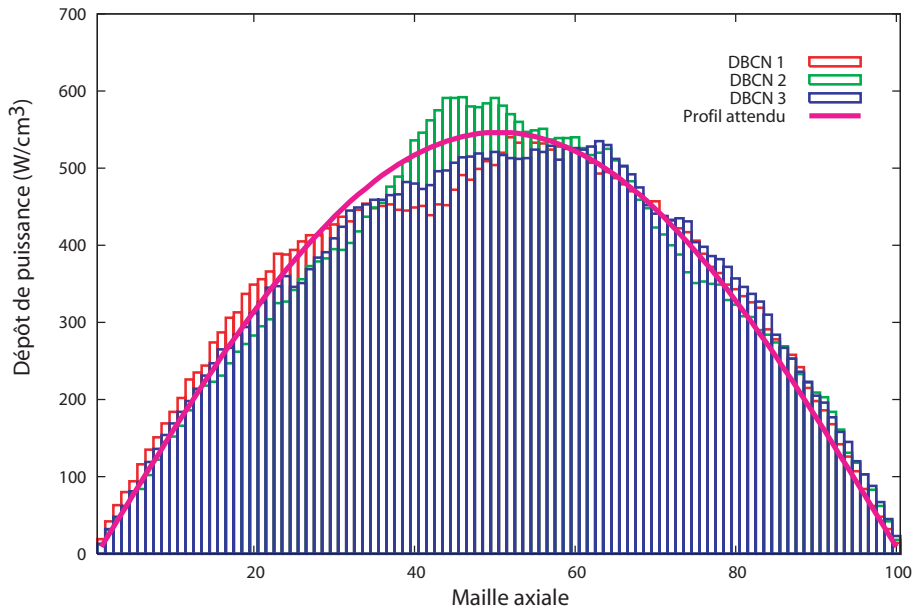


FIG. 3.14: Profils de puissance axiaux suivant différentes germes aléatoires (différentes entrées sur la carte DBCN)

centaine de cycles inactifs<sup>27</sup>. L'une avec une seule source de neutrons au centre, et l'autre avec une source de neutrons par cellule. Ainsi, pour un même nombre de neutrons propagé et de cycles inactifs, l'impact d'une source de fission plus ou moins stabilisée l'une par rapport à l'autre aurait pu être quantifié. Cependant, et pour des raisons que nous ignorons alors, les résultats ne furent pas concluant, comme peuvent en témoigner les allures des spectres : cf. figure 3.15.

Une étude plus approfondi a donc été initiée.

### 3.6.2 Présentation du cadre de l'investigation

Nous avons donc réalisé des tests neutroniques sur une géométrie réaliste d'assemblage d'un REP (cf. tableau 3.2) mais pour laquelle une discrétisation axiale accrue a été faite. La présence des 100 niveaux axiaux n'a pas de sens physique mais permet cependant de mettre en évidence le phénomène étudié.

Afin de vérifier la validité des résultats obtenus sur les différents tests de simulation, nous nous sommes placés dans un cas particulier pour lequel la solution est connue :

- température uniforme dans chaque niveau axial<sup>28</sup>,
- conditions de réflexion spéculaire sur les parois latérales de l'assemblage,
- fuites axiales (aux extrémités haute et basse de l'assemblage).

<sup>27</sup>Les cycles inactifs dans MCNP permettent le transport des neutrons mais sans prendre en compte les interactions neutron matière dans les résultats finaux. Ainsi, ces cycles permettent à l'utilisateur de se placer dans un état stabilisé.

<sup>28</sup>combustible : 1123K, gaine : 613K, eau : 580K.



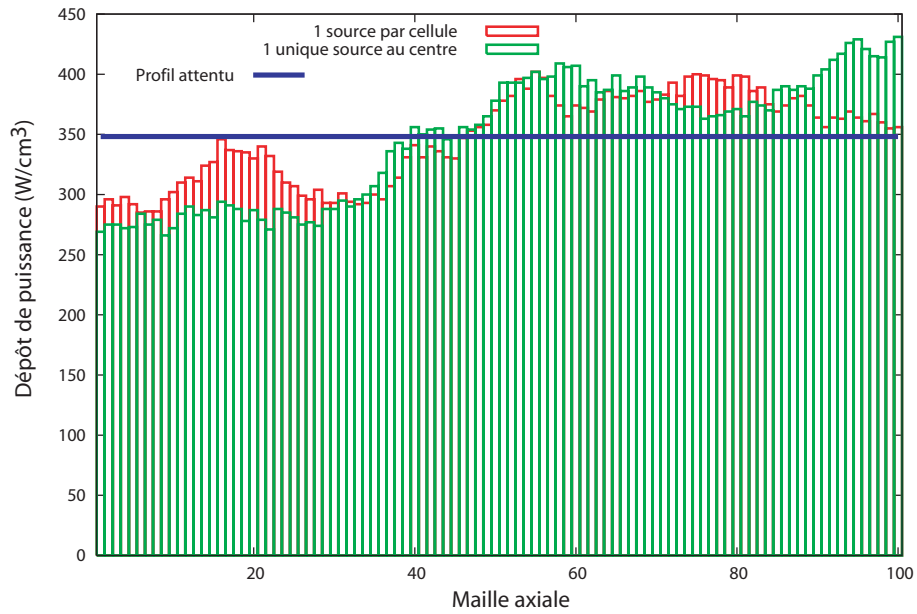


FIG. 3.15: Profils de puissance en fonction de la disposition des sources de neutrons

Ainsi, étant placé dans un cas académique, le profil de puissance est parfaitement connu et on observe un plan de symétrie au centre de l'assemblage.

Afin de quantifier les erreurs sur les dépôts de puissance, deux indicateurs ont été sélectionnés (cf. figure 3.16) :

- le premier noté  $\sigma$  mesure la symétrie du résultat, en d'autres termes, sa cohérence par rapport aux conditions limites imposées,
- le suivant est une mesure de la variance par rapport au profil réel, qui permet de vérifier si le résultat obtenu est fidèle à la réalité.

Ne bénéficiant que de peu de recul, nous avons fixé deux paramètres qui étaient cohérents avec la documentation MCNP : un nombre de cycles actifs de 150 (suffisant pour obtenir des résultats exploitables et pas trop important afin de limiter les temps de calcul), et un nombre de cycles inactifs important au regard des préconisations habituelles<sup>29</sup>. En effet, pour des calculs standard, par exemple de recherche de la valeur coefficient multiplicateur, un nombre de cycle inactif de l'ordre d'une cinquantaine est suffisant. De plus, des études de profils de puissance en 3 dimensions pour un benchmark en cœur avec MCNP[54] montraient l'utilisation de 400 cycles inactifs. Cet ordre de grandeur a donc été retenu et fixé pour les études en guise de référence.

### 3.6.3 Calculs paramétriques basés sur la statistique

Comme on peut le voir sur la figure 3.17, la cohérence sur la symétrie est respectée avec un léger avantage pour les calculs incluant plus d'une centaine de cycles inactifs. La

<sup>29</sup>Nous verrons par la suite que c'est précisément ce paramètre ci qui était déterminant

Paramètres	
Section de l'assemblage (mm)	214 x 214
Réseau	17 x 17
Nombre de crayons combustibles	264
Nombre de tubes-guides	24
Diamètre pastille (mm)	8.2
Diamètre extérieur gaine (mm)	9.5
Épaisseur gaine (mm)	0.57
Pas des crayons (mm)	12.6
Hauteur de l'assemblage (mm)	3 658
Enrichissement $UO_2$ en $^{235}U$ (%)	3.7
Tranches axiales	100

TAB. 3.2: Paramètres de simulation

même conclusion peut être formulée en ce qui concerne la qualité des résultats, cependant, des dizaines de milliers de particules sont nécessaires pour l'obtention d'un résultat exploitable. Mais l'augmentation du nombre de particules ou du nombre de cycles inactifs, ne permettent pas de mettre un terme aux oscillations visibles au delà de 100 000 particules. Malgré la statistique accrue et exagérée par rapport à la géométrie simulée, les résultats de MCNP sur les profils de flux ne sont pas exploitables ; elles le sont encore moins dans le cadre de simulations couplées avec la thermohydraulique dans le sens où l'on perd tout l'intérêt des calculs Monte Carlo, à savoir une finesse spatiale dans les résultats, et également par rapport au fait que ces fluctuations seront amplifiées au cours des ajustements thermiques apportés par les calculs thermohydrauliques. Une convergence acceptable ne sera donc jamais atteinte en l'état actuel des choses.

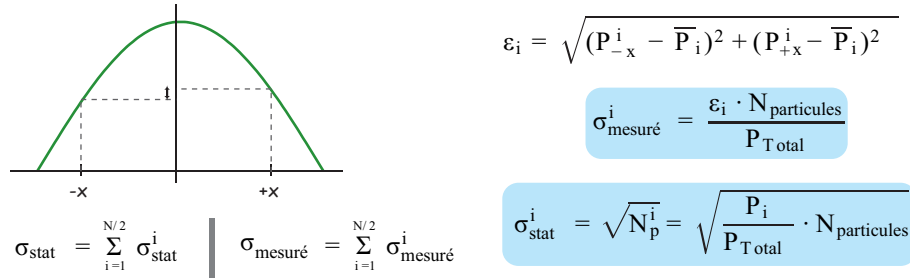
### 3.6.4 La convergence de la distribution des sources de fission

Dans des calculs Monte Carlo en criticité, la distribution des sources de neutrons est présumée convergée et stabilisée au moment où débute le calcul des *tallies* (comptage des interactions permettant le calcul des grandeurs physiques utilisables : coefficient multiplicateur, taux de réactions, ...). L'utilisation de cycles inactifs permet d'être en accord avec cette hypothèse. Les premières particules transportées n'entrent pas en compte dans l'estimation des grandeurs physiques, mais permettent simplement d'atteindre la convergence et la stabilisation des neutrons source.

Alors qu'un nombre inférieur à une centaine de cycles inactifs est suffisant pour des calculs de coefficient multiplicateur, il en faut bien plus pour obtenir une source de neutrons de fission convergée et stabilisée, surtout dans le cadre de simulations finement discrétisées spatialement[61, 62, 63]. Des études basées sur l'entropie de Shannon ont permis de montrer que plus de 2000 cycles inactifs sont nécessaires pour obtenir une source convergée[60].

Ainsi, malgré une augmentation massive du nombre de particules simulées, nos premiers

- Mesure de la corrélation entre les  $N/2$  cellules "symétriques"



- Mesure de la déviation des calculs par rapport au profil attendu ( $x^{\text{th}}$ )

$$\text{Variance} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - x_i^{\text{th}})^2 \quad \Rightarrow \quad \text{Déviation}(\%) = \frac{\text{Ecart type}}{P_{\text{Totale}}} \cdot 100$$

FIG. 3.16: Indicateurs sélectionnés pour la mesure des effets de fluctuations statistiques

tests n'avaient aucune chance de fournir une solution aux fluctuations observées initialement. Compte tenu du "faible" nombre de cycles au regard des conclusions apportés dans les articles précédemment cités, la source de fission n'était pas donc pas convergée en dépit d'une statistique accrue.

Des tests incluant cette fois un nombre de cycles inactifs importants ont permis de s'assurer des résultats sur les profils de flux en accord avec ceux attendus, et ce pour un nombre de particules plus modeste.

Une conclusion importante est à retenir à ce stade ; et de laquelle dépend la possibilité de réaliser des études couplées neutronique thermohydraulique ou d'obtenir des cartes de taux de réactions en trois dimensions sur des géométries conséquentes. Sans une source parfaitement convergée, des calculs sur une géométrie finement discrétisée requérant le calcul de quantités locales sont impossibles. L'utilisateur doit donc s'assurer de ce postulat.

Deux méthodes sont possibles :

- la première est la plus directe, chaque calcul doit bénéficier de plusieurs milliers de cycles inactifs. Mais il est évident que cette voie n'est pas compatible avec soit des études paramétriques ou d'évolution combustible nécessitant l'exécution d'une multitude de calculs MCNP ; soit un calcul couplé neutronique thermohydraulique pour le lequel plusieurs itérations sont requises. En effet, les temps de calculs en seraient lourdement affectés.
- La seconde est plus en accord avec notre cas de figure : à savoir des calculs couplés et d'évolution combustible. Elle consiste en l'exécution d'un calcul préliminaire de simple transport des particules incluant un nombre de cycles inactifs très important<sup>30</sup>, permettant uniquement la stabilisation et la convergence des sources de fission. Le calcul MCNP à la fin de son exécution fournit un fichier comportant la

<sup>30</sup> 4000 cycles inactifs ont été retenus pour les études en cœur.

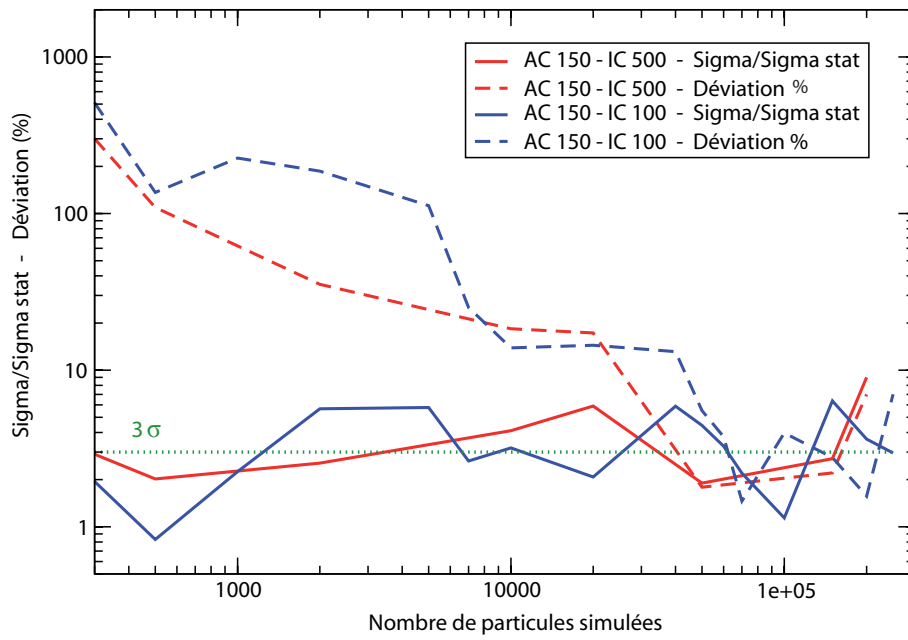


FIG. 3.17: Validité des profils de puissance en fonction du nombre de particules simulés

cartographie de cette source (appelé fichier *s* pour source). Celui-ci est ensuite réutilisé comme donnée d'entrée pour les calculs incluant des tallies<sup>31</sup> (donnée d'entrée pour la distribution spatiale des sources de fission). Ainsi un gain non négligeable sur les temps totaux de calcul est obtenu et l'utilisateur a l'assurance d'avoir toujours une distribution de neutrons source convergée et stabilisée.

C'est en partie à ce prix que l'obtention de calculs convergés après des itérations neutronique thermohydraulique, par exemple, a pu être réalisable. Le nombre d'itérations nécessaires dépend lui de la complexité de la géométrie simulée et des caractéristiques intrinsèques à la technologie du réacteur :

- dans le cas d'un assemblage d'un réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium (SFR<sup>32</sup>) où le profil de flux suit à peu près une loi en cosinus, quelques itérations sont nécessaires (cf. figure 3.18),
- en revanche, pour un assemblage de réacteur à eau bouillante (BWR<sup>33</sup>) présentant de forts gradients de flux, plus d'une dizaine d'itérations sont requises, comme dans ce cas test présenté dans la figure 3.19. C'est un cas test sur un assemblage d'un réacteur à eau bouillante de type Dodewaard mais pour lequel les lames d'eau non chauffées, qui font office de modérateur, n'ont pas été simulées. C'est un choix délibéré dans

<sup>31</sup>Chaque calcul fournissant ensuite une nouvelle carte des sources de fission pour les calculs suivant, ainsi pour des calcul itératifs ou successifs, on actualise les cartes des sources de fission en fonction des nouvelles conditions de fonctionnement du réacteur (nouvelle distribution des températures ou d'apparition et disparition de noyaux dans les cellules).

<sup>32</sup>Sodium Fast Reactor

<sup>33</sup>Boiling Water Reactor

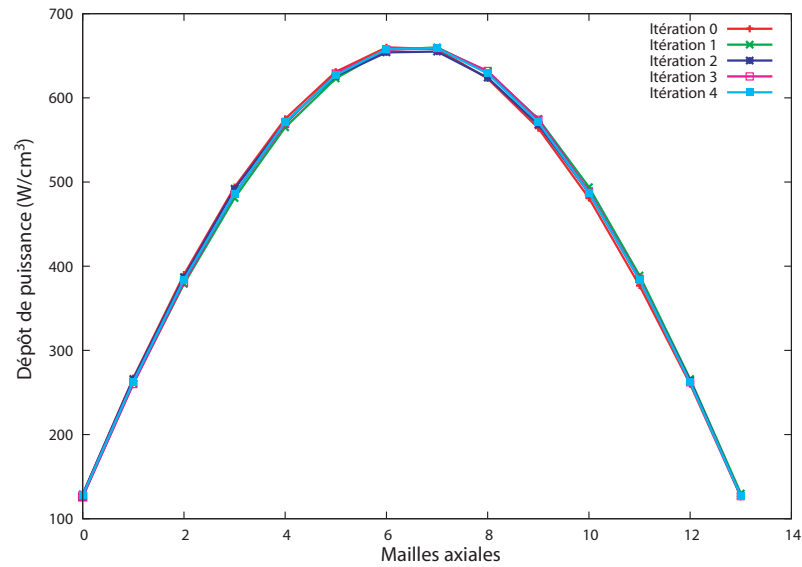


FIG. 3.18: Profil de puissance axiale d'un SFR en fonction des itérations neutronique thermohydraulique (MURE-BATH)

l'optique de vérifier la stabilité du schéma couplée dans une cas extrême d'instabilité puisque le flux résultant est fortement di-symétrique . Le profil initial de taux de vide est un profil moyen plat bien entendu non réaliste. Malgré cela, le schéma numérique a convergé après une dizaine d'itérations suivant des oscillations amorties.

### 3.6.5 Calculs test avec une source convergée

Les tests réalisés préalablement ont donc été reconduits en incorporant ces nouveaux impératifs de simulation et les résultats furent concluant comme en attestent les validations de convergence présentées dans les figures 3.18 et 3.19.

Cependant, à l'échelle de quelques assemblages<sup>34</sup>, nous avons voulu vérifier, sur un dernier cas encore plus sensible, la stabilité des sources de fission. Pour cela, nous avons simulé des assemblages de REP, discrétisés en 10 niveaux axiaux et 6 zones radiales par assemblage, pour des études locales d'évolution combustible. En effet, l'intérêt de cette thèse est d'apporter des outils de simulations couplées neutronique thermohydraulique, mais ces mêmes outils, comme l'aide à la modélisation, peuvent être employés à des fins purement neutronique.

Une source convergée a été obtenue à partir d'un calcul MCNP préliminaire incluant la simulation de 100 000 particules avec 4000 cycles inactifs. Chaque calcul MCNP utilise la source de neutrons de fission du calcul précédent, ainsi au cours de l'évolution combustible, la source de fission est réactualisée, prenant de ce fait en compte la nouvelle cartographie des sites de fission.

<sup>34</sup>Une multitude de tests ont été réalisé à l'échelle d'un ou quelques assemblages afin d'obtenir des résultats en un temps raisonnable (de l'ordre de quelques heures).

Le premier calcul se voulait déjà ambitieux dans le sens où la simulation de 100 000 histoires par cycle a été retenue (avec 300 cycles actifs). Ce qui signifie en moyenne la simulation d'environ 400 particules par cellule et par cycle (cf. figure 3.20).

Malgré une source de fission convergée et une statistique honorable, on observe des oscillations du flux non physiques au bout d'un certain temps d'irradiation (cf. tableau 3.3).

Maille axiale	Temps d'irradiation		Erreur statistique	Dispersion statistique
	330 jours	360 jours		
1	23.87 %	-17.25 %	0.25 %	5 %
2	34.52 %	-26.16 %	0.21 %	5 %
3	28.57 %	-24.87 %	0.21 %	5 %
4	15.01 %	-19.42 %	0.21 %	5 %
5	0.54 %	-10.88 %	0.21 %	5 %
6	-11.83 %	0.40 %	0.21 %	5 %
7	-20.88 %	13.99 %	0.21 %	5 %
8	-26.14 %	26.29 %	0.21 %	5 %
9	-28.48 %	32.95 %	0.21 %	5 %
10	-19.38 %	22.79 %	0.26 %	5 %

TAB. 3.3: Oscillations relatives du flux au cours de l'irradiation

Celles-ci s'expliquent très bien d'un point de vue numérique : une légère dissymétrie axiale dans le flux induit un léger surplus d'irradiation sur une extrémité de l'assemblage. Au pas MCNP suivant, cette extrémité ayant subi des taux de réactions plus importants, notamment de fission, celle-ci se retrouve avec moins de noyaux fissiles que son "homologue"<sup>35</sup>. Ce qui crée un déséquilibre dans le profil de flux qui est amplifié au cours de chaque période d'évolution combustible. Les oscillations suivent donc une loi divergente.

La source de fission étant convergée, la raison de ces oscillations s'explique par le degré de couplage entre les cellules. En effet, dans le cas d'une simulation à forte discrétisation spatiale, la vérification a priori de la convergence de la source de fission et l'utilisation d'une statistique satisfaisante en terme d'erreur statistique sur les valeurs globales (comme le coefficient multiplicateur) n'est pas suffisante. Le problème vient du couplage entre cellules : si elles ne sont que faiblement couplées, à savoir qu'un neutron naissant dans une cellule n'interagit que très peu avec les autres cellules, alors on perd la corrélation entre toutes les cellules de la géométrie. Ce qui revient à dire que toutes les cellules sont indépendantes les unes des autres. Or, même dans le cas des réacteurs à eau où le libre parcours moyen des neutrons est de l'ordre de la dizaine de centimètres, il existe une

<sup>35</sup>Cette simulation a été réalisée suivant une homogénéité axiale et des conditions de fuite des neutrons sur les pléniums supérieurs et inférieurs. La conséquence est une symétrie parfaite du flux par rapport à l'axe central. C'est la raison pour laquelle nous parlons de cellules homologues.

probabilité non négligeable que des neutrons puissent parcourir des distances bien plus importantes.

Si l'on se place maintenant dans le cadre précis de cette simulation, avec un découpage axial en 10 niveaux, chaque niveau a une hauteur d'une trentaine de centimètres. La majorité des neutrons issus des fissions ne sortent donc pas de la cellule dans laquelle ils sont nés ou très peu. Les cellules sont donc décorréliées les unes par rapport aux autres par manque de statistique (en fait du nombre de particules simulées par cycle). Soit il faut découper la géométrie en zones et niveaux permettant des hauteurs de cellule au maximum du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen du neutron, soit augmenter le nombre de particules simulées par cycle afin d'avoir plus de chance de simuler le transport de neutrons hors de leur zone de naissance<sup>36</sup>. La première solution implique deux problèmes, et non des moindres : le premier est une augmentation significative du temps de calcul (bien plus importante que pour une augmentation de la statistique). Et si le découpage est trop fin cela se traduirait par une violation d'une hypothèse faite en thermohydraulique : la hauteur de chaque maille doit être très supérieure au diamètre du crayon chauffant (pour ce qui est des simulations couplées neutronique thermohydraulique). De plus, cette approche, même si elle aurait pu sembler être astucieuse à l'origine, ne permet pas de régler le problème. En effet, c'est le suivi d'un nombre conséquent des rares histoires longues de neutrons qui a de l'importance pour le phénomène en question. Ainsi un découpage très fin conduira effectivement à ce que les neutrons visitent des cellules voisines. Mais une faible statistique ne permettra toujours pas le transport de ces neutrons dans des cellules éloignées. Ainsi, le problème du couplage spatial entre cellules n'est pas résolu par cette approche (cf. annexe B).

En conséquence, l'augmentation du nombre de particules simulées par cycle semble être la seule voie envisageable, et la plus efficace en terme de rapidité d'exécution : en effet la simulation de grands nombres de neutrons par cycle est plus efficace pour les calculs en parallèle (en comparaison avec une augmentation du nombre de cycles actifs à statistique constante<sup>37</sup>). Ainsi cela permet la possibilité que des neutrons visitent des cellules éloignées du point de départ, et de ce fait augmenter le couplage spatial entre les cellules. Cet aspect a été vérifié à statistique constante (avec plus de mille neutrons par cellule en moyenne, cf. figure 3.21) et cette fois ci les profils de flux en fonction de l'irradiation sont cohérents.

### 3.7 Conclusion sur les conditions à respecter pour les calculs couplés

Plusieurs éléments doivent donc être respectés avant toute simulation couplée neutronique thermohydraulique, et plus généralement dans le cadre de simulations neutroniques

<sup>36</sup>En fait, augmenter le nombre de particules simulées par cycle permet d'augmenter le nombre des quelques histoires très longues de neutron. D'ailleurs, dans une simulation non critique, ce phénomène n'intervient pas car les neutrons de fission sont suivis, et le couplage entre cellules est assuré.

<sup>37</sup>Effet d'attente des processeurs sur des points de rendez-vous (à chaque cycle), surtout si un accès disque est requis.

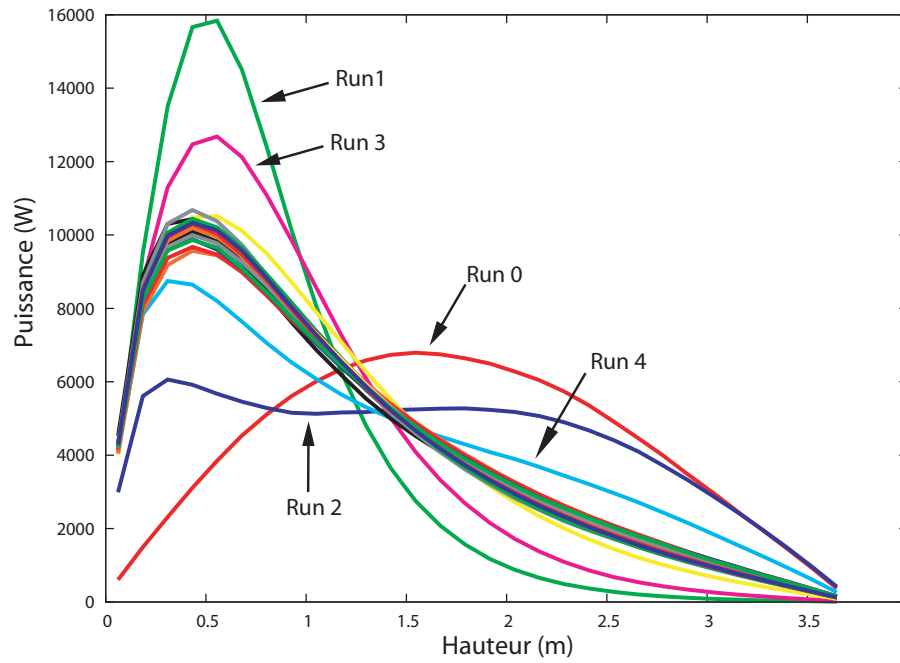
pour lesquelles des résultats locaux sont attendus :

- une source de neutrons de fission convergée et stabilisée,
- une statistique de neutrons par cellule et par cycle suffisante.

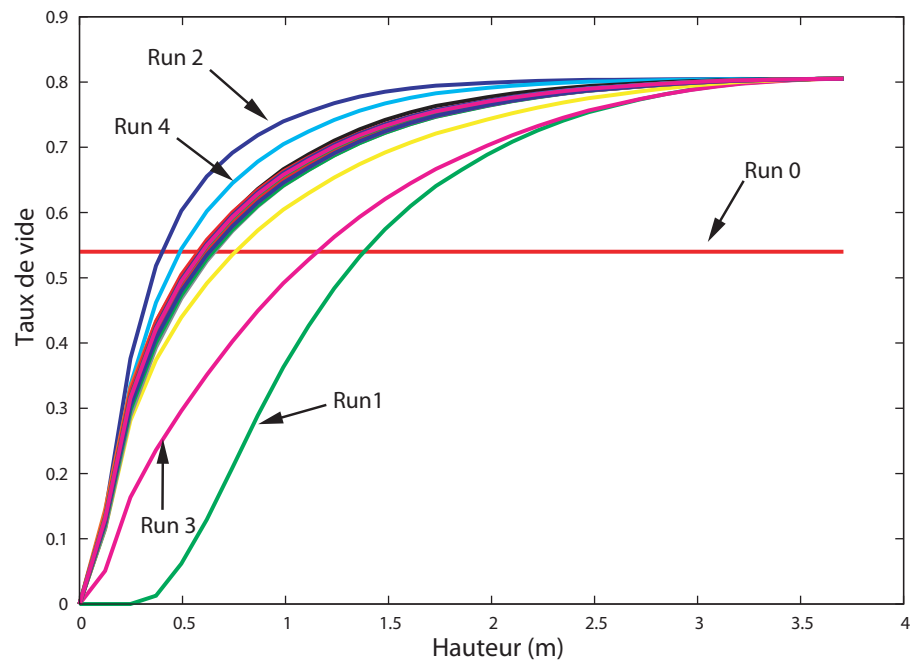
De plus en ce qui concerne les calculs couplés seuls :

- une discrétisation spatiale correctement réalisée (groupement de cellules et respect des hypothèses thermohydrauliques),
- une disponibilité de sections efficaces en fonction de la température.





(a) Profil de puissance en fonction des itérations



(b) Profil de taux de vide en fonction des itérations

FIG. 3.19: Convergence neutronique thermohydrauliques (MURE-COBRA) pour un assemblage de BWR

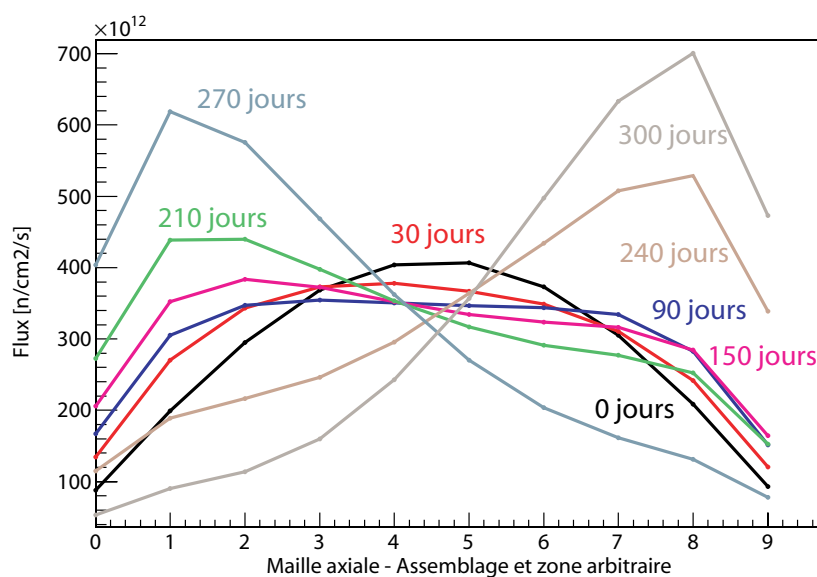


FIG. 3.20: Profil axial de flux en fonction du temps d'irradiation - 100.000 particules, 300 cycles actifs (les temps indiqués sont en jours équivalent pleine puissance)

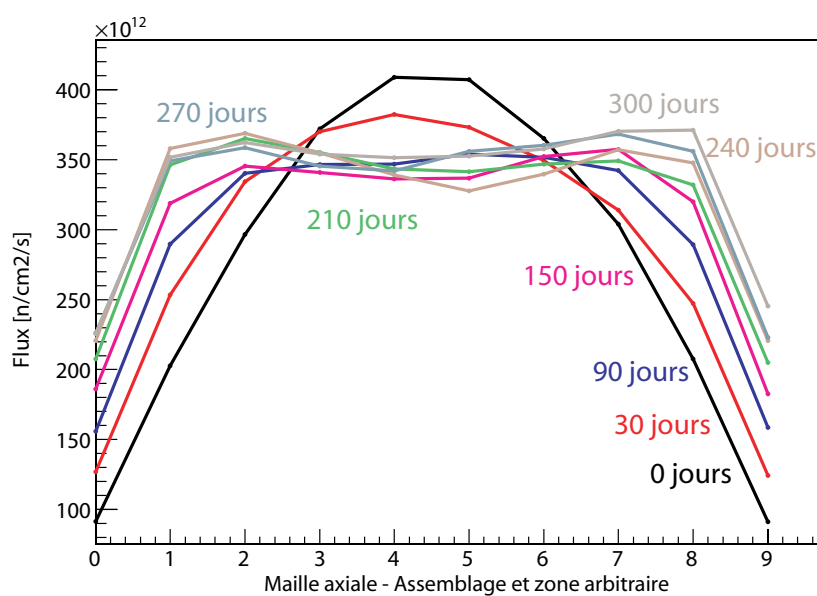


FIG. 3.21: Profil axial de flux en fonction du temps d'irradiation - 300.000 particules, 100 cycles actifs (les temps indiqués sont en jours équivalent pleine puissance)



## Chapitre 4

# Validation du schéma couplé MURE - MCNP - COBRA

La robustesse du schéma numérique a été testée, et les résultats principaux liés ont été présentés dans le chapitre précédent. L'étape suivante consiste à valider et/ou qualifier le schéma couplé MURE - MCNP - COBRA. La qualification, c'est à dire la comparaison des simulations avec des expériences en réacteur, aurait été la meilleure preuve de la qualité des résultats fournis par ce couplage. Cependant, le manque d'accès à des données complètes et locales sur des mesures en réacteur nous a poussé à réaliser une validation du schéma couplé. Ce qui signifie comparer des résultats de simulations entre différents codes.

Cela soulève une contrainte. En effet, les conclusions ne peuvent pas confirmer ou infirmer réellement la véracité des résultats, puisque c'est une comparaison relative à d'autres résultats de simulation<sup>1</sup>. En conséquence, la validation telle qu'elle est mise en oeuvre dans ce chapitre a un caractère qualitatif, même si des études quantitatives ont été menées, notamment en se plaçant dans certaines conditions de simulation similaires en ce qui concerne par exemple, la méthode de solution de l'équation de Boltzmann.

Pour valider ce couplage 3D automatisé MURE - MCNP - COBRA, nous avons choisi un cas extrême de réacteur présentant une très forte hétérogénéité<sup>2</sup>, tant au niveau des enrichissements isotopiques, que du burn-up, des types combustibles fissiles et des aspects structurels. Cette géométrie spéciale a fait l'objet d'un benchmark NEA incluant plusieurs codes couplés[54]. Cependant tous ces codes, notamment pour la partie neutronique, sont des codes nodaux. Ce qui implique un traitement bien différent de l'équation de transport que celui fait par MCNP. Cette première différence est déjà prémisse d'écarts sur les résultats sans même l'emploi du couplage avec la thermohydraulique. De même pour la thermohydraulique, la majorité de ces codes couplés n'incluent pas de description en trois dimension, mais seulement des calculs sur des canaux moyens.

---

<sup>1</sup>Sauf si ces codes couplés ont fait l'objet d'une qualification sur la géométrie simulée.

<sup>2</sup>Ce qui représente un test rigoureux pour ce couplage 3D.

## 4.1 Présentation du benchmark

Il s'agit donc d'un benchmark de codes couplés neutronique thermohydraulique, avec comme objectif final la simulation d'un accident : éjection d'une grappe de contrôle. La géométrie du cœur est celle d'un REP traditionnel de type Westinghouse. Celui-ci est partiellement chargé en MOX, avec du plutonium de qualité militaire. La présence d'assemblages MOX a un impact important sur les paramètres cinétiques du réacteur : par exemple la fraction de neutrons retardés sera plus faible que dans le cas d'un cœur chargé à 100 % d'assemblages UOX, et plus particulièrement dans ce cas puisque le plutonium d'origine militaire est essentiellement composé de  $^{239}\text{Pu}$  (cf. chapitre suivant).

Neuf groupes ont participé aux calculs, fournissant 12 solutions distinctes suivant des méthodes de résolutions des équations différentes :

- méthode de diffusion nodale à deux groupes : CORETRAN, EPISODE, NUREC, PARCS, SKETCH-INS[54] ;
- méthode de transport multi-groupes avec une modélisation de cellules homogènes : BARS, DORT[54] ;
- méthode de transport multi-groupes hétérogène avec une correction  $P0$  : DeCART[54] ;
- méthode de transport Monte Carlo : MCNP-4C2[54].

Les deux derniers codes n'ont fourni que des résultats partiels, ils n'ont notamment pas fait l'oeuvre d'un couplage avec des codes de thermohydraulique.

### 4.1.1 Configuration du cœur

Le cœur présente une symétrie par huitième (cf. figure 4.1), mais les simulations que nous avons effectuées portent sur le quart du cœur, afin par exemple de s'assurer de la cohérence des résultats qui doivent obligatoirement être symétriques suivant la diagonale du quart de cœur.

La simulation comporte des plenums inférieur et supérieur, ainsi que des assemblages réflecteurs remplis d'eau. Les assemblages se distinguent en deux types : UOX et MOX (cf. figure 4.2) présentant 6 enrichissements différents et 7 niveaux d'irradiation<sup>3</sup>. Les vecteurs isotopiques se composent d'une centaine de noyaux.

Chaque type d'assemblage présente des structures et des arrangements de cellules bien particuliers (cf. figure 4.3), composés de différents matériaux (cf. tableau 4.2). Cette simulation intègre deux types de poison consommable : l'IFBA<sup>4</sup> et le WABA<sup>5</sup>, utilisés tous deux pour contrôler la réactivité des assemblages au cours de l'irradiation. La conséquence sera une forte variation du profil de dépôt de puissance au sein même des assemblages, comme nous le verrons dans les sections suivantes.

---

<sup>3</sup>Seuls sont précisés ici des aspects généraux des paramètres de simulation, la liste exhaustive est disponible en annexe.

<sup>4</sup>Integral Fuel Burnable Absorber

<sup>5</sup>Wet Annular Burnable Absorber

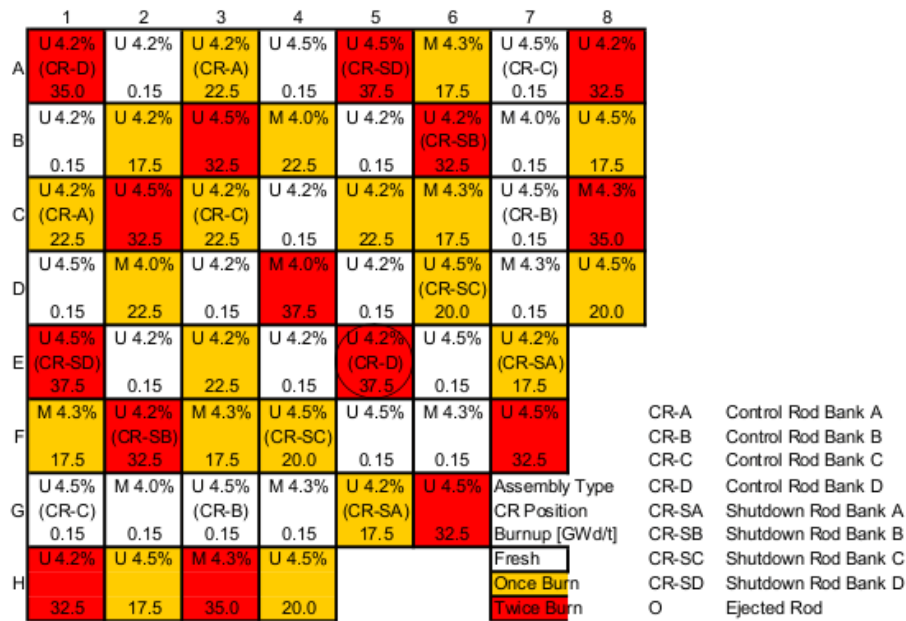


FIG. 4.1: Configuration du cœur

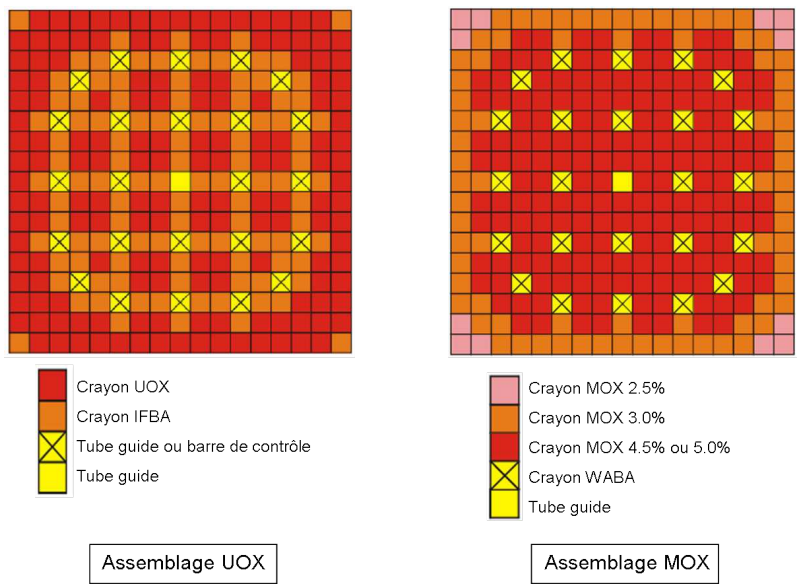


FIG. 4.2: Configuration des assemblages

Code	Laboratoire	Méthode de solution	Nombre de groupes	Homogénéisation
CORETRAN 1/FA	PSI	Diffusion nodale	2	Assemblage homogène
CORETRAB 4/FA	PSI	Diffusion nodale	2	Assemblage homogène
EPISODE	Osaka Univ.	Diffusion nodale	2	Assemblage homogène
NUREC	KAERI	Diffusion nodale	2	Assemblage homogène
PARCS 2G	Purdue Univ.	Diffusion nodale	2	Assemblage homogène
PARCS 4G	Purdue Univ.	Diffusion nodale	4	Assemblage homogène
PARCS 8G	Purdue Univ.	Diffusion nodale	8	Assemblage homogène
SKETCH	JNES	Diffusion nodale	2	Assemblage homogène
BARS	Kurchatov Inst.	Matrices Lambda	5	Cellule homogène
DeCART	SNU/KAERI	MOC - P0	47	Cellule hétérogène
DORT	GRS	$S_N$	16	Cellule homogène
MCNP-4C2	Kurchatov Inst.	Monte Carlo	Continue	Cellule hétérogène

TAB. 4.1: Caractéristiques détaillées des codes

Cellule / Zone	Combustible	IFBA	Tube guide	Barre de contrôle	WABA
r0 - r1	combustible	combustible	eau	absorbant	eau
r1 - r2	lame de gaz	IFBA	gaine	gaine	gaine
r2 - r3	gaine	lame de gaz	/	eau	WABA
r3 - r4	/	gaine	/	gaine	gaine
r4 - r5	/	/	/	/	eau
r5 - r6	/	/	/	/	gaine

TAB. 4.2: Composition des cellules

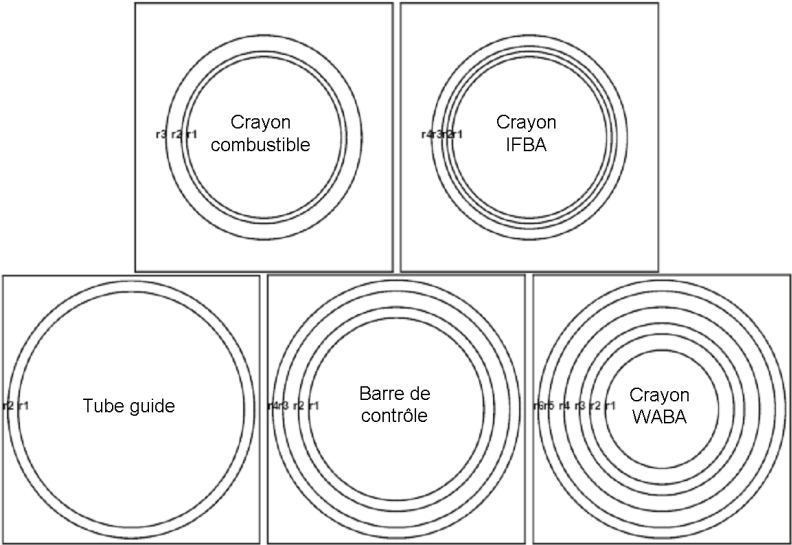


FIG. 4.3: Géométrie des cellules



### 4.1.2 Description des calculs du benchmark

L'étude dans le benchmark se décompose en plusieurs parties :

- calcul 2D à températures fixées,
- calcul 3D couplé avec la thermohydraulique dans les conditions de puissance nominale (HFP<sup>6</sup>),
- calcul 3D dans les conditions de puissance nulle (HZP<sup>7</sup>),
- calcul du transitoire (voir chapitre 5).

## 4.2 Simulation 3D couplée sur 4 assemblages

### 4.2.1 Présentation du cadre d'étude

Afin d'effectuer une première comparaison des résultats de notre couplage avec ceux du benchmark, nous avons réalisé une étude sur les quatres assemblages centraux (A1, A2, B1 et B2 - cf. figure 4.1). Compte tenu des temps de calculs requis pour la simulation d'un cœur entier, cette première étape a permis d'obtenir rapidement des résultats et de régler les derniers détails du schéma couplé.

Nous avons imposé des conditions de réflexion spéculaire autour des 4 assemblages, afin de reproduire un milieu infini pour l'étude de l'assemblage A1. La simulation de ses plus proches voisins permet de prendre en compte leur impact sur le flux. Axialement, au delà des plénums, des conditions de flux nuls sont appliquées.

Les conditions de symétrie du cœur imposent une symétrie par quart sur l'assemblage A1 (cf. figure 4.4).

### 4.2.2 Vérification de la convergence et comparaison avec le benchmark

Comme dans toute simulation comportant une discrétisation accrue de l'espace, un nombre important de particules sont nécessaires afin d'obtenir des résultats locaux corrects. Dans ce cas précis voici les conditions de simulation<sup>8</sup> :

---

<sup>6</sup>Hot Full Power : puissance du réacteur = 100%

<sup>7</sup>Hot Zero Power : puissance du réacteur =  $1.10^{-4}$  de la puissance nominale

<sup>8</sup>Rappel : comme dans tous les calculs réalisés, la distribution initiale des neutrons de fission a été calculée au préalable, ce qui autorise un nombre de cycles inactifs réduit

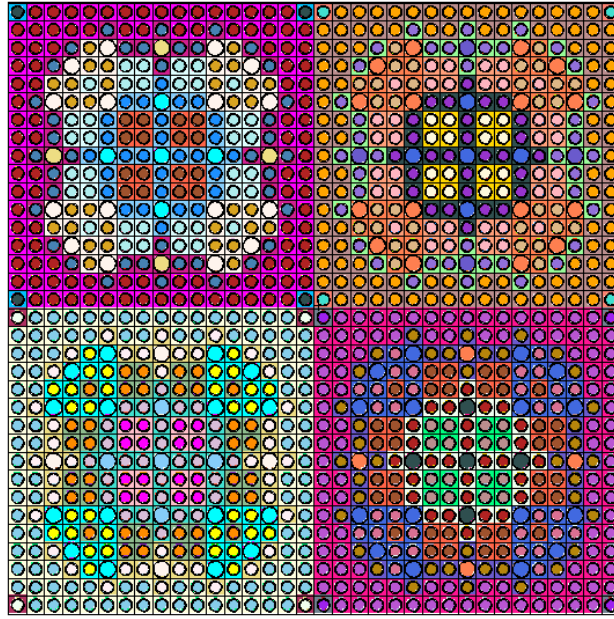


FIG. 4.4: Coupe radiale de la géométrie simulée

Paramètres	Valeurs
Zones radiales / assemblage	7
Niveaux axiaux / assemblage	10
Nombre de particules	200 000
Nombre de particules / cellule / cycle	700
Nombre de cycles actifs	200
Nombre de cycles inactifs	100
Temps de calcul par itération (8 processeurs en OMP)	160 min

TAB. 4.3: Paramètres de simulation

Nous avons recherché une convergence cellule par cellule avec des fluctuations du même ordre de grandeur que la dispersion statistique (quelques pourcent). Cette convergence a été atteinte au bout d'environ dix itérations (cf. figure 4.5).

La composition hétérogène de l'assemblage implique des variations de flux. Les résultats fournis par le couplage MURE - MCNP - COBRA sont en accord avec les résultats du benchmark. Les écarts observés (cf. figure 4.6) sont dans les 2% de marges relatives sur les dépôts de puissance entre les codes du benchmark. Seule la zone 7 présente un écart de l'ordre de 4 %. Mais il s'agit des 4 crayons positionnés aux coins de l'assemblage, sur lesquels la statistique est bien moins importante. De plus cet écart peu aussi s'expliquer par la nature du traitement du transport qui diffère suivant les codes, et la spécificité spatiale de ces cellules. Sur les profils axiaux de dépôts de puissance, les écarts sur les

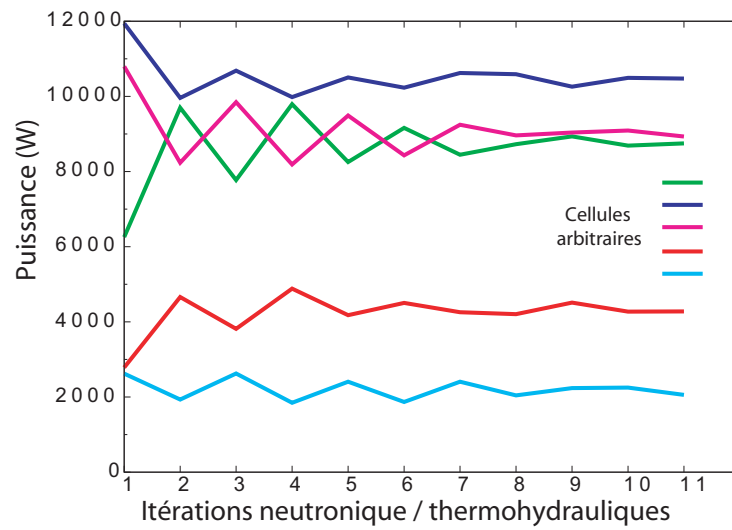


FIG. 4.5: Convergence cellule par cellule

résultats sont inférieurs à 1%.

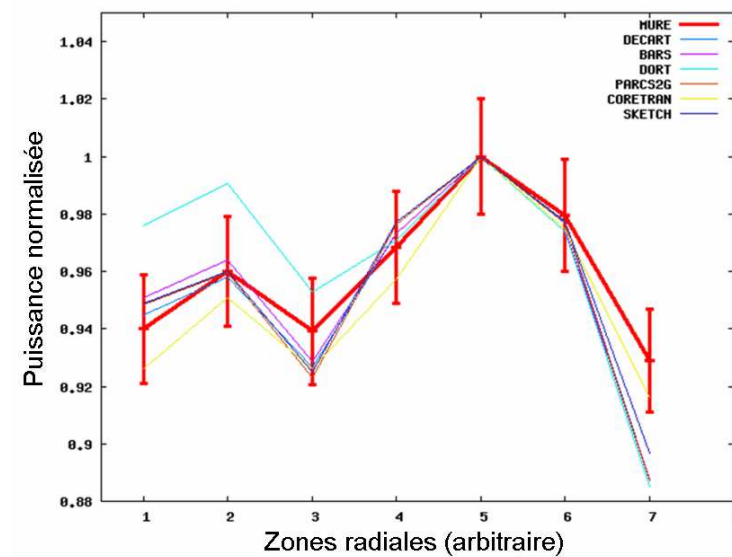


FIG. 4.6: Comparaison radiale des dépôts de puissance au sein de l'assemblage A1

Ainsi, si l'on se place dans des conditions de transport des neutrons équivalentes (isotropie imposée par le groupement des cellules), les résultats des calculs couplés sont en parfait accord avec ceux du benchmark. Nous verrons que dans un calcul 3D avec la prise en compte de l'anisotropie (groupement de cellules plus fin permettant de se rapprocher d'une simulation crayon par crayon), les résultats diffèrent nettement.

### 4.2.3 Profils de puissance

Les profils de puissance axiaux sont en meilleur accord avec les résultats du benchmark et ce pour une raison simple : ce sont des profils moyens que nous comparons. Le benchmark ne dispose pas des profils axiaux par assemblage ; il en va de même pour la carte des températures, pour laquelle nous ne disposons pas non plus des profils radiaux, seule la température moyenne par assemblage est disponible (ce qui explique pourquoi seuls les profils de puissance sont comparés).

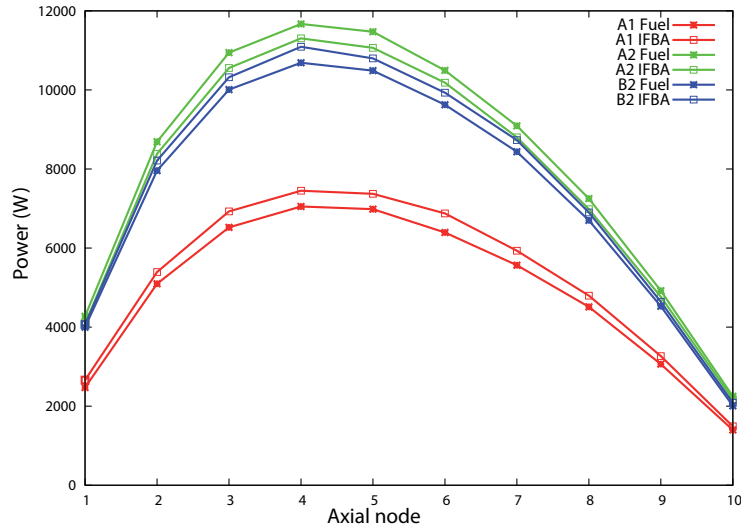


FIG. 4.7: Profils axial de puissance

Sur la figure 4.7, sont présentés les profils axiaux de trois assemblages suivant s'il s'agit d'un crayon combustible traditionnel ou muni d'un poison consommable en périphérie (IFBA). La première observation porte bien évidemment sur les écarts de dépôt de puissance suivant si l'assemblage est neuf (A2), s'il a subi un cycle d'irradiation modéré (B2 - burn-up : 17.5 GWj/t) ou si l'assemblage en est à son troisième cycle (A1 - burn-up : 35 GWj/t). Les puissances totales décroissent respectivement. Les taux de réactions sont plus importants à la base des assemblages qu'aux extrémités hautes grâce à une meilleure thermalisation des neutrons (la masse volumique de l'eau décroît le long de la colonne).

L'impact du poison consommable (composé de bore : IFBA) est très net, et modifie la cartographie des dépôts de puissance en fonction du niveau d'irradiation :

- sur l'assemblage neuf A2, le poison consommable protège le combustible qui est à l'intérieur de la couronne, et subit moins de fission en comparaison aux crayons traditionnels,
- c'est l'inverse pour les assemblages irradiés B2 et A1, avec une augmentation de l'écart du nombre fission entre les crayons traditionnels et les crayons IFBA avec le burn-up.

Bien que cet aspect soit la conséquence directe de phénomènes neutroniques, leurs impacts sur la température du caloporteur n'est peut être pas à négliger. D'où l'intérêt d'une

simulation 3D aussi fine que possible avec un couplage thermohydraulique afin de vérifier si les canaux chauds respectent les conditions de sûreté en fonctionnement nominal.

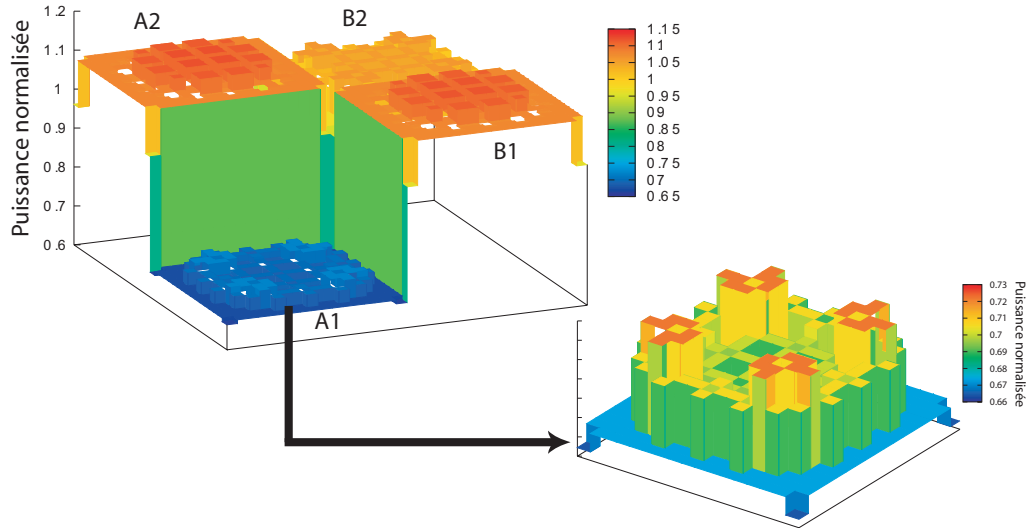


FIG. 4.8: Cartes des puissances par assemblage

Le niveau d'irradiation de chaque assemblage impose des écarts sur les puissances globales déposées dans chacun d'eux (cf. figure 4.8), les températures moyennes de sortie en sont donc affectées. De plus, les nuances des profils de dépôts de puissance au sein même des assemblages impliquent des gradients de température en sortie bien différents pour chacun d'eux (cf. figure 4.9).

Ces assemblages A1 et A2 représentent les deux extrêmes d'irradiation possible, l'un est très irradié et l'autre est neuf. La première conséquence est un taux de réaction global par assemblage bien différent. Et également en se focalisant sur chacun d'eux, des nappes de puissance distinctes. Si l'on considère l'assemblage A1, les températures de sortie présentent des variations de l'ordre d'un degré. Si cet écart entre minimum et maximum est si réduit, c'est grâce aux courants transverses qui peuvent être pris en compte dans la simulation. L'aspect tri-dimensionnel de COBRA autorise ces phénomènes qui tendent à homogénéiser les températures de part les gradients de masses volumiques créant des circulations transverses du fluide, et favorisés par la turbulence. Si des calculs sur un canal moyen ou chaud avaient été réalisés (par exemple avec BATH), alors les gradients de température en sortie auraient été bien plus importants (de l'ordre de la dizaine de degrés). D'où la nécessité de pouvoir réaliser des études à l'échelle du crayon lorsque les assemblages présentent des niveaux d'hétérogénéité importants.

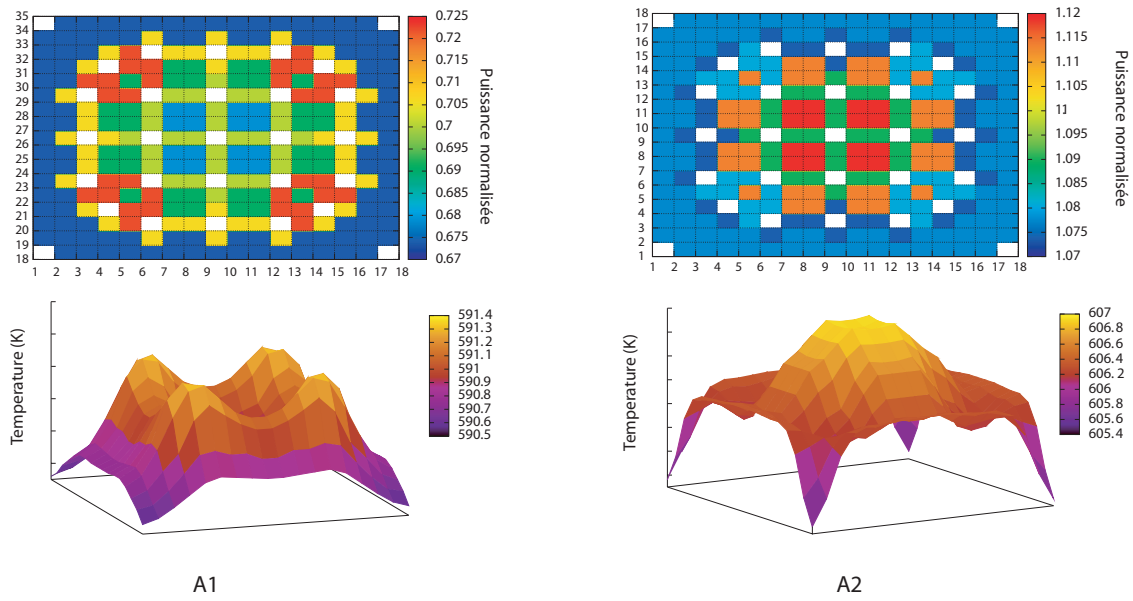


FIG. 4.9: Cartes des dépôts de puissance et températures de sortie associées

### 4.3 Simulation 3D couplée du cœur

Les simulations du cœur complet ont mis en relief des limites informatiques à ce schéma couplé. En effet, la simulation d'un cœur complet très hétérogène avec une nécessité de résultats locaux, impliquant donc un niveau de discrétisation accru, est synonyme de temps de calculs très long (suivant le niveau de discrétisation, de la statistique employée, et du nombre de processeur sélectionné : de quelques heures à une trentaine d'heures par itération).

#### 4.3.1 Paramètres de simulation

Le benchmark fournit des résultats en trois dimensions pour les seuls assemblages sur la diagonale : A1, B2, C3, D4, E5, F6 (cf. figure 4.1). En conséquence un découpage réduit à son minimum a été apporté à tous les assemblages sauf ceux précédemment cités. En effet, pour des raisons de temps de calcul lié à la statistique requise, ce choix a été retenu<sup>9</sup>. Ainsi les assemblages UOX ne bénéficient que de deux zones radiales (une pour les crayons traditionnels, et l'autre pour les crayons IFBA) ; quant aux assemblages MOX, trois zones radiales ont été réalisées (une pour chaque niveau d'enrichissement).

Les assemblages pour lesquels le benchmark fournit des détails sont pourvus de 20 zones radiales ainsi disposées : cf. figure 4.10 (elles tiennent compte de la nature des crayons et de leur position dans l'espace : près des tubes d'eau ou de barres de poison consommables par exemple)

<sup>9</sup>Des problèmes informatiques liés au compilateur dans le cadre de calculs en parallèle nous ont obligé à réduire le degré de raffinement.

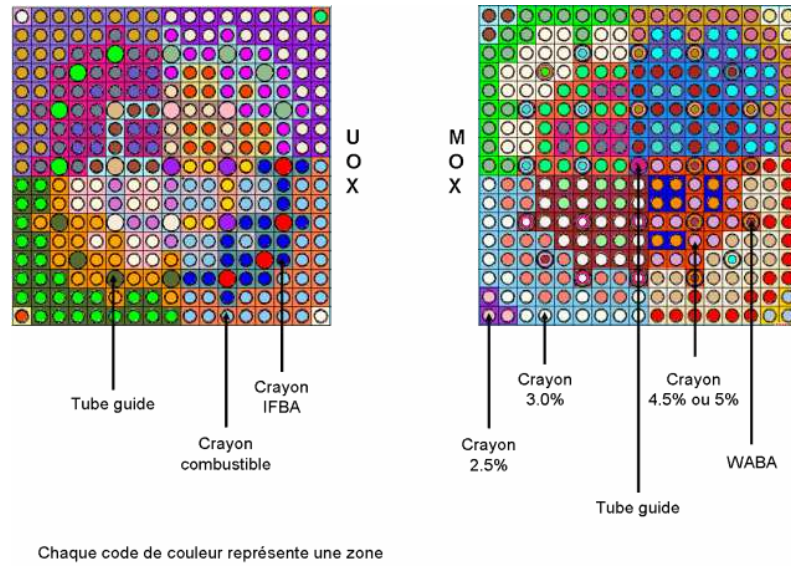


FIG. 4.10: Groupement de cellules dans les assemblages UOX et MOX

Dans le tableau 4.4 sont spécifiés les paramètres de simulation retenus dans le cadre des calculs 3D à puissance nominale.

Paramètres	Valeurs
Zones radiales / assemblage en diagonale	20
Niveaux axiaux / assemblage en diagonale	10
Nombre de particules	500 000
Nombre de particules / cellule / cycle	400
Nombre de cycles actifs	200
Nombre de cycles inactifs	100
Temps de calcul par itération (6 processeurs en OMP)	~ 1 jour

TAB. 4.4: Paramètres de simulation du cœur

Pour quantifier les écarts entre les calculs du benchmark, un indicateur pondéré a été utilisé : PWE (Power Weighted Error). Il pondère les écarts suivant l'importance de la zone : les écarts dans les zones de faibles puissance sont diminués et inversement.

$$PWE = \frac{\sum_i |e_i| P_{ref_i}}{\sum_i P_{ref_i}} \quad (4.1)$$

et

$$e_i = \frac{P_{calculée_i} - P_{ref_i}}{P_{ref_i}} \quad (4.2)$$

avec :

- $i$  représente la  $i$ ème région,
- $P$  la puissance déposée, soit de référence, soit calculée.

Le choix du code dit de référence est imposé par le benchmark, et dépend de la disponibilité des résultats des codes (exemple : le code Decart ne permet pas des calculs couplés avec la thermohydraulique, c'est donc le code PARCS qui est pris comme référence pour les calculs en conditions nominales présentés ci-dessous).

### 4.3.2 Calculs 3D à puissance nominale

#### Recherche de la convergence

L'atteinte de la convergence a nécessité environ 10 itérations et plusieurs jours de calculs (le profil de température du premier calcul neutronique est réaliste). Nous avons utilisé deux indicateurs comme paramètres d'arrêt des itérations :

- l'un basé sur la somme des écarts entre itérations sur toutes les cellules de chaque assemblage (cf. figure 4.11),
- l'autre sur le maximum d'écart de puissance dans une cellule entre itérations (cf. figure 4.12).

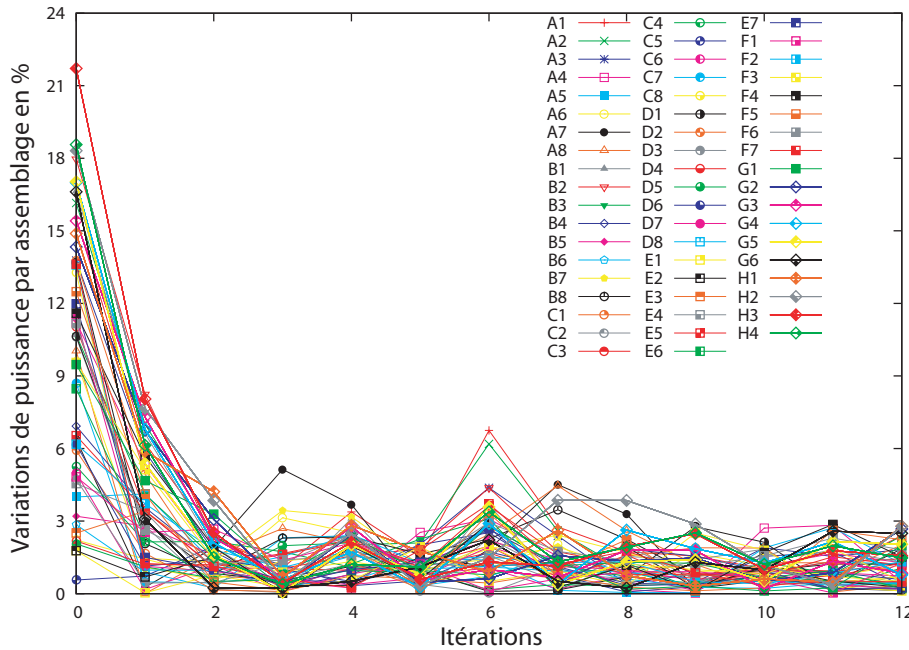


FIG. 4.11: Variations totales de puissance par assemblage au cours des itérations : la variation de totale de puissance par assemblage correspond à  $V = \frac{\sum_k |P_{i,k} - P_{i-1,k}|}{P_{assemblage}}$ , avec l'indice  $k$  représentant la  $k$ ème cellule, l'indice  $i$  la  $i$ ème itération,  $P$  la puissance déposée dans la cellule  $k$ .

En conclusion, la convergence a été atteinte avec des variations totales inférieures à 3%, ce qui correspond à des fluctuations moyennes par cellule inférieure au pourcent. Les



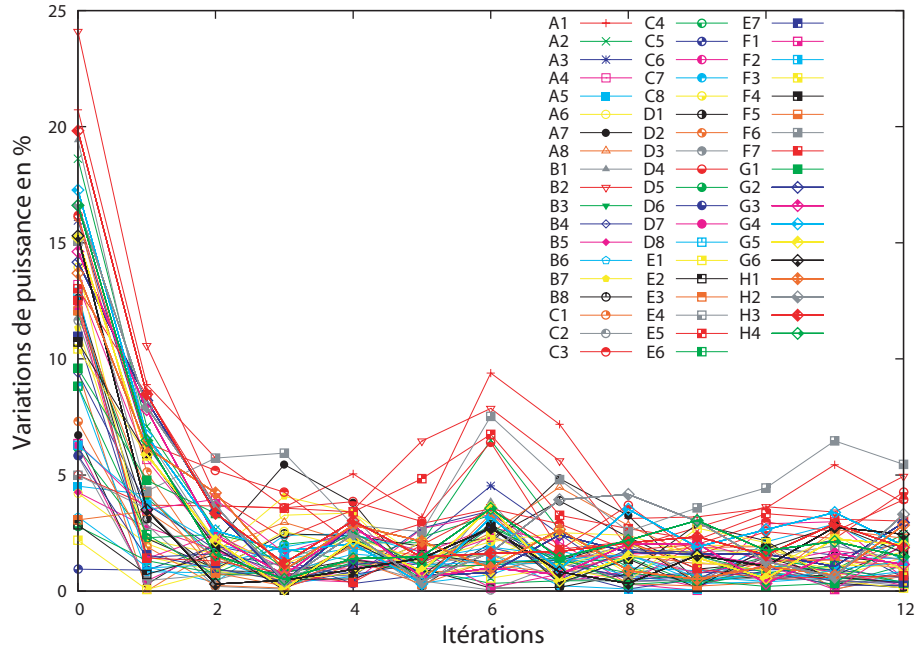


FIG. 4.12: Mesure de l'écart maximal de puissance dans une cellule d'assemblage au cours des itérations : la variation de puissance maximale dans une cellule par assemblage correspond à  $V_{max} = \frac{\max_k |P_{i,k} - P_{i-1,k}|}{\frac{P_{i,k} + P_{i-1,k}}{2}}$ , avec l'indice  $k$  représentant la  $k$ ème cellule, l'indice  $i$  la  $i$ ème itération,  $P$  la puissance déposée dans la cellule  $k$ .

fluctuations maximales observées ne dépassent pas 5%.

### Exploitation des résultats

L'avantage de ce type de couplage est sa capacité à simuler finement l'espace, ainsi nous avons accès aux données globales comme aux propriétés locales (cf. figure 4.13). Le profil de puissance montre de forts gradients radialement. La raison principale, comme pour le flux axial, sont les fuites de neutrons aux extrémités. De plus, les assemblages en bordure, ont tous subi au moins un cycle d'irradiation. Ainsi le profil est cohérent avec ce qu'on pouvait attendre. De plus, on retrouve une symétrie par huitième (imposé par l'arrangement des assemblages), ce qui constitue une validation qualitative de la bonne convergence des résultats et conforte le choix de la statistique employé. Cette même symétrie se retrouve au sein de l'assemblage D4 (cf. figure 4.13). En effet, les assemblages l'entourant sont identiques deux à deux, sauf pour les assemblages C3 et E5. Les burn-up respectifs de ces deux assemblages et le fait que les neutrons sont moins importants en bordure qu'au centre du cœur expliquent le profil obtenu sur l'assemblage D4.

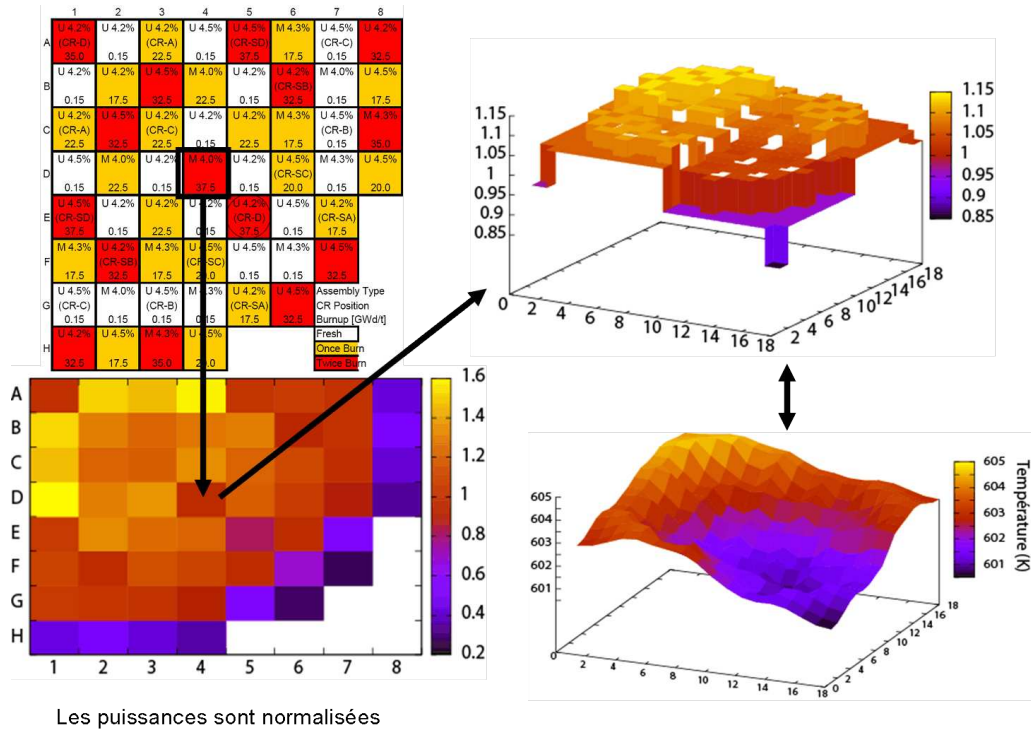


FIG. 4.13: Distribution de puissance dans le cœur (HFP)

### Comparaison avec les codes du benchmark

Une comparaison quantitative avec les codes du benchmark a été réalisée. Cependant, compte tenu des méthodes de solution de l'équation de transport et de la simulation des écoulements thermohydraulique (fait pour un canal moyen par assemblage pour le calcul dit de référence du benchmark), des conclusions sur la justesse des résultats ne peuvent être fournies. Seules des comparaisons relatives entre codes sont possibles. Malgré les différences sur les dépôts de puissance par assemblage, les allures de nappe de puissance sont identiques (cf. figure 4.14).

Les écarts les plus importants se situent près des bordures à conditions de réflexion. Ceci pourrait être un élément d'explication : un traitement des conditions de réflexion différent entre les codes. Rappelons cependant qu'il ne faut pas confondre une modélisation physique dans MCNP (comme des conditions de réflexion) avec les méthodes d'intégration numérique dans un code déterministe. Les biais numériques introduits suivant les lignes d'intégration, ou par approximation de la physique du choc élastique, provoquent des erreurs systématiques numériques d'intégration.

Néanmoins, la complexité du benchmark choisi et l'utilisation de bases de données différentes de section efficace rendent très difficile l'interprétation des écarts observés. De plus, on peut mettre en doute la convergence des calculs MCNP lorsque l'on constate des écarts significatifs sur des points de calculs symétriques, écarts que l'on ne retrouve pas avec les méthodes déterministes.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.09	1.37	1.19	1.37	1.01	1.12	1.12	0.49
B	1.37	1.25	1.07	1.2	1.3	0.97	1.11	0.58
C	1.19	1.07	1.17	1.33	1.21	1.19	1.11	0.48
D	1.37	1.2	1.33	1.07	1.29	1.18	1.01	0.4
E	1.01	1.3	1.21	1.29	0.93	1.12	0.64	
F	1.12	0.97	1.19	1.18	1.12	0.84	0.32	
G	1.12	1.11	1.11	1.01	0.64	0.32		
H	0.49	0.58	0.49	0.4				

Calcul de référence

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.05	1.48	1.40	1.5	1.01	1.07	1.04	0.45
B	1.48	1.32	1.19	1.26	1.29	0.95	1.04	0.54
C	1.41	1.2	1.25	1.35	1.22	1.14	1.01	0.44
D	1.53	1.28	1.36	1.02	1.23	1.1	0.93	0.37
E	1.04	1.33	1.24	1.24	0.88	1.03	0.59	
F	1.1	0.98	1.18	1.12	1.04	0.76	0.31	
G	1.08	1.08	1.05	0.95	0.61	0.31		
H	0.47	0.57	0.46	0.38				

Calcul MURE

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	-3.9	8.3	18.0	9.2	0.3	-4.7	-7.0	-7.6
B	8.4	6.0	11.6	4.7	-0.5	-2.4	-6.4	-7.2
C	18.7	12.5	6.8	1.1	0.7	-3.8	-8.7	-8.3
D	11.7	6.7	1.9	-5.1	-4.6	-7.1	-8.3	-7.0
E	3.3	2.1	3.0	-3.5	-5.5	-8.1	-7.2	
F	-1.9	1.2	-1.4	-5.2	-7.0	-9.2	-2.9	
G	-3.4	-2.7	-5.7	-6.3	-5.3	-2.1		
H	-3.9	-2.6	-4.3	-4.0				

Ecart en %

FIG. 4.14: Comparaison des dépôts de puissance radiaux (HFP)

Ainsi la comparaison entre le code MURE et les codes du benchmark sur les écarts de puissance pondérés (PWE), montrent une nette différence. Mais celle-ci n'est très certainement pas liée au schéma couplé, seulement aux méthodes de simulation neutronique. D'ailleurs un calcul en transport  $S_N$  avec une représentation hétérogène des milieux présente lui aussi des écarts importants[64].

Au contraire, les écarts au sein même des assemblages sont bien plus réduits (cf. tableau 4.6 - la comparaison est possible car toutes les puissances sont renormalisées).

On remarque cependant qu'un assemblage présente des écarts par rapport au calcul de référence plus importants que les autres : l'assemblage F6. Notamment entre eux : les calculs avec CORETRAN ou EPISODE montrent également des disparités importantes sur cet assemblage situé à une position spatiale extrême. Ces codes traitent de manière identique le transport des neutrons, c'est donc probablement sur les options d'intégration que ces codes se distinguent (conditions aux limites, traitement des chocs, ...).

Code	% PWE
nodal	
CORETRAN	0.31
EPISODE	0.4
NUREC	0.31
PARCS 2G	ref
PARCS 4G	0.31
PARCS 8G	0.55
SKETCH-INS	1.04
hétérogène	
MURE	5.83
TORT-TD/CTF[64]	13.89

TAB. 4.5: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage (HFP)

	Assemblage					
	A1	B2	C3	D4	E5	F6
nodal						
CORETRAN	1.07	0.92	0.90	2.62	1.38	4.60
EPISODE	3.08	2.67	3.01	3.47	3.44	10.47
NUREC	0.08	0.17	0.24	0.32	0.13	0.89
PARCS	ref	ref	ref	ref	ref	ref
SKETCH-INS	0.09	0.11	0.18	0.58	0.22	0.87
hétérogène						
MURE	1.7	2.36	2.36	1.9	1.65	7.53

TAB. 4.6: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon (HFP)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
1	1.04	1.00	1.09	1.07	1.07	1.08	1.07	1.07	1.07	1.07	1.07	1.08	1.07	1.07	1.08	1.00	1.04
2	1.00	1.04	1.00	1.20	1.21	1.01	1.21	1.20	1.01	1.20	1.20	1.01	1.21	1.20	1.00	1.04	1.00
3	1.09	1.00	1.19	1.19	1.20	0.00	1.17	1.16	0.00	1.16	1.17	0.00	1.19	1.19	1.18	0.99	1.08
4	1.07	1.20	1.19	0.00	1.17	1.15	1.10	1.10	1.13	1.09	1.10	1.14	1.17	0.00	1.18	1.19	1.06
5	1.07	1.21	1.20	1.17	1.13	1.13	1.08	1.08	1.11	1.08	1.08	1.12	1.12	1.16	1.19	1.20	1.05
6	1.08	1.01	0.00	1.15	1.13	0.00	1.10	1.10	0.00	1.09	1.10	0.00	1.11	1.13	0.00	1.00	1.06
7	1.07	1.21	1.17	1.10	1.08	1.10	1.07	1.07	1.10	1.06	1.06	1.09	1.07	1.09	1.15	1.18	1.05
8	1.07	1.20	1.16	1.10	1.08	1.10	1.07	1.08	1.12	1.07	1.06	1.08	1.06	1.08	1.14	1.17	1.04
9	1.07	1.01	0.00	1.13	1.11	0.00	1.10	1.12	0.00	1.12	1.09	0.00	1.09	1.10	0.00	0.98	1.04
10	1.07	1.20	1.16	1.09	1.08	1.09	1.06	1.07	1.12	1.07	1.05	1.08	1.05	1.07	1.13	1.16	1.03
11	1.07	1.20	1.17	1.10	1.08	1.10	1.06	1.06	1.09	1.05	1.05	1.08	1.06	1.07	1.13	1.16	1.03
12	1.08	1.01	0.00	1.14	1.12	0.00	1.09	1.08	0.00	1.08	1.08	0.00	1.09	1.11	0.00	0.97	1.03
13	1.07	1.21	1.19	1.17	1.12	1.11	1.07	1.06	1.09	1.05	1.06	1.09	1.09	1.13	1.15	1.16	1.01
14	1.07	1.20	1.19	0.00	1.16	1.13	1.09	1.08	1.10	1.07	1.07	1.11	1.13	0.00	1.13	1.14	1.01
15	1.08	1.00	1.18	1.18	1.19	0.00	1.15	1.14	0.00	1.13	1.13	0.00	1.15	1.13	1.13	0.94	1.02
16	1.00	1.04	0.99	1.19	1.20	1.00	1.18	1.17	0.98	1.16	1.16	0.97	1.16	1.14	0.94	0.98	0.94
17	1.04	1.00	1.08	1.06	1.05	1.06	1.05	1.04	1.04	1.03	1.03	1.03	1.01	1.01	1.02	0.94	0.97

(a) Calcul PARCS (référence)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
1	1.08	1.08	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	1.09	1.06	1.06	1.06	1.06	1.06	1.06	1.06	1.03	1.03
2	1.08	1.09	1.09	1.21	1.21	1.09	1.21	1.21	1.06	1.17	1.17	1.06	1.17	1.17	1.06	1.06	1.03
3	1.09	1.09	1.21	1.21	1.21	0	1.21	1.21	0	1.17	1.17	0	1.17	1.17	1.06	1.06	1.06
4	1.09	1.21	1.21	0	1.21	1.11	1.11	1.11	1.11	1.11	1.11	1.11	1.17	0	1.17	1.17	1.06
5	1.09	1.21	1.21	1.21	1.11	1.11	1.07	1.07	1.11	1.07	1.07	1.11	1.11	1.17	1.17	1.17	1.06
6	1.09	1.09	0	1.11	1.11	0	1.11	1.11	0	1.11	1.11	0	1.11	1.11	0	1.06	1.06
7	1.09	1.21	1.21	1.11	1.07	1.11	1.07	1.11	1.07	1.11	1.07	1.11	1.07	1.11	1.17	1.17	1.06
8	1.09	1.21	1.21	1.11	1.07	1.11	1.07	1.07	1.11	1.07	1.07	1.11	1.07	1.11	1.17	1.17	1.06
9	1.09	1.09	0	1.11	1.11	0	1.11	1.11	0	1.07	1.07	0	1.07	1.07	0	1	1
10	1.06	1.18	1.18	1.09	1.06	1.09	1.06	1.06	1.09	1.04	1.04	1.07	1.04	1.07	1.12	1.12	1
11	1.06	1.18	1.18	1.09	1.06	1.09	1.06	1.06	1.09	1.04	1.04	1.07	1.04	1.07	1.12	1.12	1
12	1.06	1.06	0	1.09	1.09	0	1.09	1.09	0	1.07	1.07	0	1.07	1.07	0	1	1
13	1.06	1.18	1.18	1.18	1.09	1.09	1.06	1.06	1.09	1.04	1.04	1.07	1.07	1.12	1.12	1.12	1
14	1.06	1.18	1.18	0	1.18	1.09	1.09	1.09	1.09	1.07	1.07	1.07	1.12	0	1.12	1.12	1
15	1.06	1.06	1.18	1.18	1.18	0	1.18	1.18	0	1.12	1.12	0	1.12	1.12	1.12	1	1
16	1.04	1.06	1.06	1.18	1.18	1.06	1.18	1.18	1.06	1.12	1.12	1	1.12	1.12	1	1	0.94
17	1.04	1.04	1.06	1.06	1.06	1.06	1.06	1.06	1.06	1	1	1	1	1	1	0.94	0.94

(b) Calcul MURE

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
1	3.57	7.23	0.19	2.01	1.81	0.92	1.75	2.02	1.59	1.12	1.38	2.19	1.29	1.08	2.88	2.86	0.79
2	7.23	4.25	8.86	0.53	0.67	7.39	0	0.43	5.04	3.33	3.7	4.41	4.23	2.96	6.03	1.48	3.19
3	0.19	8.86	1.73	1.44	0.66	0	3.82	4.41	0	0.7	0.23	0	2.68	1.79	1.4	6.37	2.18
4	2.01	0.53	1.44	0	3.21	4.07	0.56	1.17	2.18	1.13	0.69	3.75	0.08	0	1.36	2.13	0.03
5	1.81	0.67	0.66	3.21	2.17	1.76	0.82	0.26	0.17	0.15	0.5	1.29	1.48	0.52	1.8	2.95	0.13
6	0.92	7.39	0	4.07	1.76	0	0.66	1.11	0	1.18	1.02	0	0.84	2.87	0	5.87	0.36
7	1.75	0	3.82	0.56	0.82	0.66	0.64	0.88	0.81	1.09	1.19	1.47	0.37	2	2.03	1.45	0.87
8	2.02	0.43	4.41	1.17	0.26	1.11	0.88	0.22	1.43	0.06	1.54	2.09	1.17	2.91	3.01	0.56	1.61
9	1.57	8.2	0	1.97	0.04	0	1.02	1.22	0	4.82	2.12	0	2.21	3.76	0	1.96	4.15
10	0.47	2.5	1.53	0.59	1.68	0.54	0.44	1.47	2.67	3.14	1.61	1.12	1.84	0.18	1.26	4.69	3.09
11	0.73	2.87	1.06	1.03	2.03	0.7	0.34	0.01	0.03	1.61	1.38	1.08	1.91	0.26	1.28	4.5	2.79
12	1.54	5.06	0	5.47	3.01	0	0.25	0.37	0	1.12	1.08	0	2.47	4.22	0	2.73	3.04
13	0.64	3.4	1.85	0.91	3.2	2.56	1.16	0.36	0.06	1.84	1.91	2.47	2.36	1.24	3.16	3.93	1.67
14	0.43	2.13	0.96	0	1.35	4.59	0.28	1.19	1.61	0.18	0.26	4.22	1.24	0	1.84	2.19	0.95
15	2.23	6.68	0.57	0.53	0.97	0	2.86	3.84	0	1.26	1.28	0	3.16	1.84	1.01	5.62	2.15
16	4.11	2.13	7.02	1.3	2.12	6.52	0.62	0.27	8.41	4.69	4.5	2.73	3.93	2.19	5.62	1.74	0.66
17	0.46	4.44	1.53	0.62	0.78	0.29	1.52	2.26	2.3	3.09	2.79	3.04	1.67	0.95	2.15	0.66	2.42

(c) Écarts crayon par crayon entre MURE et PARCS en %

FIG. 4.15: Dépôts de puissance au sein de l'assemblage D4 (HFP)

### 4.3.3 Calculs 2D à températures fixées

Un calcul 2D à températures fixées sans plénum et avec des conditions de réflexion axiales a été simulé, afin de quantifier les écarts de simulation entre MURE/MCNP et les autres codes du benchmark. Les écarts observés sont donc dus à des effets purement neutronique.

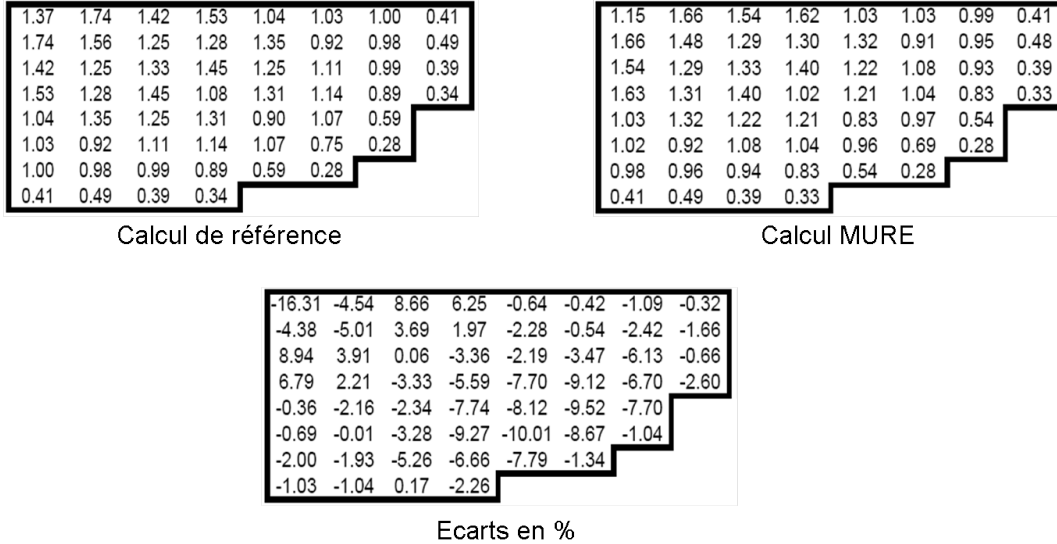


FIG. 4.16: Comparaison des dépôts de puissance radiaux à températures fixées

Les écarts basés sur l'estimateur PWE sont précisés dans le tableau 4.7.

Les commentaires, sur les méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann et la complexité du benchmark, explicités dans la section précédente, apparaissent être les seules explications que nous pouvons formuler. Malgré un résultat sur le coefficient multiplicateur en accord avec les autres codes, la répartition des dépôts de puissance présente quelques différences.

Les écarts sur les dépôts de puissance avec le calcul MCNP du benchmark est sans doute le plus troublant. Néanmoins, la statistique qu'ils ont employée est en désaccord avec les recommandations sur la convergence des sources de fission[61, 62, 63, 60] et avec nos propres conclusions (cf. chapitre 3) sur la nécessité de privilégier le nombre de particules simulées par rapport au nombre de cycles actifs afin d'avoir une entropie maximale (cf. tableau 4.8).

Code	% PWE	Coefficient multiplicateur
nodal		
CORETRAN 1/FA	1.06	1.06387
CORETRAN 4/FA	0.96	1.06379
EPISODE	0.96	1.06364
NUREC	0.96	1.06378
PARCS 2G	0.96	1.06379
PARCS 4G	0.90	1.06376
PARCS 8G	0.86	1.06354
SKETCH-INS	0.97	1.06379
hétérogène		
BARS	1.29	1.05826
DeCART	ref	1.05852
DORT	0.86	1.06036
MCNP	0.67	1.05699
MURE	4.58	1.05759

TAB. 4.7: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage et du coefficient multiplicateur (Calcul 2D)

Paramètres/Code	Cycles inactifs	Cycles actifs	Nombre de particules par cycle
MCNP (benchmark)	400	9800	5.000
MURE / MCNP	source convergée	200	1.000.000

TAB. 4.8: Comparaison des paramètres de simulation MCNP

#### 4.3.4 Calculs 3D à puissance nulle

Un calcul à puissance nulle ( $10^{-4}\%$  de la puissance nominale) a été réalisé afin de déterminer les conditions initiales de l'accident d'éjection de barres. Les barres d'arrêt d'urgence sont hors du cœur et les barres de contrôle insérées (assemblages A1, A3, A7, C1, C3, C7, E5, G1, G3).

Une comparaison avec les résultats du benchmark montre une nette augmentation des écarts sur la répartition des dépôts de puissance (cf. tableau 4.9 et figure 4.17).

Code	% PWE
nodal	
CORETRAN 1/FA	1.26
CORETRAN 4/FA	1.09
EPISODE	1.05
NUREC	1.05
PARCS 2G	1.05
PARCS 4G	1.11
PARCS 8G	1.20
SKETCH-INS	1.06
hétérogène	
BARS	2.65
DeCART	ref
MURE	8.63

TAB. 4.9: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance (HZP)

Ainsi, au plus l'hétérogénéité augmente, au plus les écarts sur la répartition spatiale des dépôts de puissance s'agrandissent (donc toutes les grandeurs locales) entre les méthodes déterministes présentées dans ce benchmark et les méthodes Monte Carlo. Cependant aucune conclusion sur la véracité des résultats n'est envisageable.

Une comparaison sur le profil des dépôts de puissance (en statique : deux calculs MCNP) entre le cas où toutes les barres de contrôle sont insérées et celui pour lequel la grappe de contrôle de l'assemblage E5 a été éjectée est présentée dans la figure 4.18.

Compte tenu de la position de l'assemblage E5 dans le réacteur, l'éjection de ces barres ne provoque pas de modifications locales de la nappe de puissance. Au contraire les perturbation engendrées sont réparties sur tout le cœur.



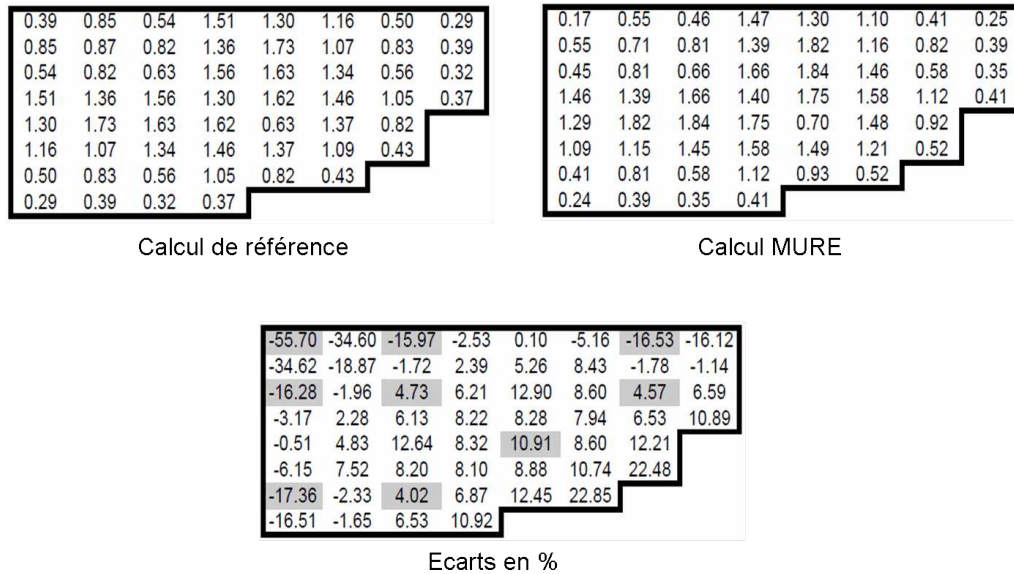


FIG. 4.17: Comparaison des dépôts de puissance radiaux à puissance nulle et les barres de contrôle insérées : les cellules grisées représentent les assemblages dans lesquels les barres de contrôle sont insérées - Paramètres de simulation : 1.000.000 de particules par cycle - 300 cycles actifs.

1.07	-0.39	-0.20	-0.56	-0.40	0.12	-0.40	-0.61
1.89	0.13	-1.11	-0.66	-0.63	-0.35	-0.56	-1.60
1.99	0.93	-0.70	-1.09	-0.93	-0.72	-0.52	-2.14
2.21	0.83	-0.72	-0.81	-1.14	-0.51	-0.89	-2.09
1.44	0.70	-0.24	0.20	0.33	0.31	-0.42	
1.20	0.71	-0.03	0.76	1.58	1.78	0.66	
-1.17	-1.17	0.47	0.83	0.93	1.67		
-1.55	-2.41	-0.66	0.44				

FIG. 4.18: Impact de l'éjection des barres de contrôle de l'assemblage E5 sur la nappe de puissance (calculs statiques MCNP)

## Chapitre 5

# Développement d'outils pour les calculs de transitoires

Dans l'optique finale de la simulation de transitoires en situation accidentelle ou incidente, plusieurs outils, toujours automatisés, ont été implémentés dans MURE.

Dans un premier temps, un module de cinétique point a été ajouté. Il représente une première étape simplifiée pour les études de dynamique. En effet, l'évolution de la population neutronique et de la concentration des précurseurs sont les deux paramètres principaux à étudier au cours d'un transitoire. Avec la cinétique point, nous n'avons pas accès à l'évolution spatiale. Par exemple, comme nous le verrons dans un accident d'éjection de barres de contrôle, seules des valeurs globales sont disponibles. Dans le cas de la simulation d'accidents sur des réacteurs à neutrons rapides, la cinétique point peut offrir de bons résultats[65]. Cependant, dans le cas de réacteurs à neutrons thermiques, la cinétique point est bien moins adaptée car les résultats obtenus par celle-ci ne seront valables que localement.

Or, après perturbation du système, qui n'est généralement pas uniforme dans tout l'espace, ces perturbations locales vont se propager au système entier. Plus le libre parcours moyen des neutrons est grand et leur durée de vie courte, plus le réajustement de la forme du flux se fera en un temps court (quelques millisecondes) et sera léger (pour peu que la perturbation initiale le soit aussi). Après quoi, c'est le niveau global du flux qui variera. Ainsi dans les RNR, la cinétique ponctuelle peut être bien adaptée. En effet, en comparaison avec les réacteurs à neutrons thermiques, les réacteurs à neutrons rapides sont en général de plus petite taille, le libre parcours moyen des neutrons est plus grand, ce qui a pour conséquence un bien meilleur couplage spatial des différentes régions du cœur. De ce fait, la forme globale du flux est difficilement modifiable dans un RNR.

Mais dans le cas où la forme du flux peut subir de fortes variations locales, on ne pourra prédire avec succès l'évolution totale de la puissance. Seule une tendance sera accessible (cf. section 5.4). Notamment dans le cas d'éjection d'une barre de contrôle, si on utilise un modèle ponctuel alors qu'en réalité l'effet local est important, cette erreur systématique provoquera une surestimation de l'impact de l'incident. Ce qui va à l'encontre d'une étude

de sûreté, surtout si les profils de flux initiaux et tous les paramètres cinétiques ont été calculés à partir d'une simulation 3D précise. Ceci est à garder à l'esprit dans ce chapitre.

*La nécessité de recourir à un calcul énergie-espace-temps n'est pas la même dans un réacteur rapide et dans un réacteur thermique (Ott,1985).*

## 5.1 Calcul du temps de génération des neutrons

Avant tout calcul de cinétique, certains paramètres doivent être calculés. Le temps de génération effectif des neutrons en est le principal, il exprime la moyenne du temps interfission. Il gouverne la cinétique des réacteurs. Les ordres de grandeur sont les suivants :

- réacteur à eau sous pression chargé en UOX :  $\sim 60\mu s$
- réacteur à neutrons rapides :  $< 1\mu s$ .

Deux méthodes applicables à MCNP existent :

- une méthode par perturbations
- une méthode utilisant la durée de vie moyenne d'un neutron

### 5.1.1 Méthode des perturbations

Elle a été proposée par Verboomen et al.[66, 67], et permet de calculer le temps de génération effectif par perturbation de la réactivité du cœur, en utilisant un poison dont la section efficace de capture suit une loi en  $1/v$ . Le détail de cette technique n'est pas explicité, mais grâce à deux simulations MCNP en faisant varier par exemple la teneur en bore 10, la détermination du temps de génération effectif est possible.

Cette méthode doit être utilisée dans les cas où le spectre est rapide, et le cœur fortement couplé (des perturbations locales se propagent rapidement à l'ensemble du cœur). Ainsi dans des réacteurs à neutrons rapides de petite taille[68, 69] disposant notamment de réflecteurs, cette méthode est incontournable.

### 5.1.2 Méthode directe

En revanche, dans le cas de réacteurs thermiques de grande taille et donc fortement découplé, la pondération par le flux adjoint pour le calcul du temps de génération n'est pas indispensable comme le montrent les résultats présentés ci-après.

Notons  $l_p$  la durée de vie moyenne d'un neutron prompt dans le cœur. Le temps de génération est défini ainsi :

$$\Lambda = \frac{l_p}{k_{eff}} \quad (5.1)$$

Le calcul de  $\Lambda^1$  par cette méthode dans le cas du cœur présenté dans le benchmark a fourni un temps de génération de  $1,263.10^{-5}$ s.

Un calcul en code déterministe pondéré par le flux adjoint a donné une valeur pour  $\Lambda_{eff}$  de  $1,26.10^{-5}$ s[70].

## 5.2 Calcul automatisé des fractions de neutrons retardés

La valeur de la fraction de neutrons retardés est également une donnée essentielle pour les calculs de cinétique des réacteurs. Une erreur sur cette valeur affecte directement la nature de l'excursion de puissance, et participe à la stabilité ou non du système. Plus cette valeur est grande, moins le réacteur est sensible à de petites perturbations. Dans l'optique de résoudre les équations de la cinétique, une méthode automatisée de calcul de la fraction de neutrons retardé a été implémentée dans MURE.

### 5.2.1 Rappels

La population neutronique comprend deux groupes : les neutrons prompts, émis  $10^{-17}$ s après la fission, et les neutrons retardés qui sont émis avec un retard par rapport à la scission de l'atome. Ce sont des réactions de dés-excitation de certains produits de fission qui sont à l'origine de cette émission. Le temps au bout duquel ils émettent le neutron libre varie suivant le précurseur (en moyenne ce temps est égal au temps de vie beta du précurseur). Ces neutrons ont une énergie bien plus faible (quelques centaines de keV) que les neutrons prompts qui eux sont émis à plus de 2 MeV. D'où une notion d'importance des neutrons qui varie suivant le spectre du réacteur. Celle-ci est prise en compte dans le calcul de la fraction des neutrons retardés, notamment par une pondération par le flux adjoint.

La fraction de neutron retardés, notée  $\beta$ , est la proportion totale des neutrons retardés, c'est à dire la somme des  $\beta_i$ . En effet, les neutrons retardés sont émis à des temps différents suivant le noyau qui a fissionné, et la vitesse du neutron qui a provoqué cette fission (cf. tableau 5.1 [5]). Ainsi, on les classe selon  $i$  groupes de décroissance (cf. tableau 5.2[5]).

Des données existent pour chaque noyau fissile[71], mais ces valeurs sont généralement dépendantes d'un domaine énergétique, c'est à dire propre à un type de réacteur. Elles ne sont donc pas transposables dans n'importe quel cas. Or, nous nous sommes efforcés de créer des outils génériques, non dépendants d'un certain type de technologie. De plus l'essence même de MURE est la possibilité d'explorer de nouvelles voies, au travers de nouveaux designs de géométrie, d'optimisation d'enrichissement et plans de chargement, ... Toutes ces variantes conduisent à une modification des valeurs de fraction de neutrons retardés. Il nous fallait trouver une méthode de calcul indépendante du spectre, et qui soit

---

<sup>1</sup>Nous ne parlons pas de  $\Lambda_{eff}$  mais de  $\Lambda$  car notre calcul ne prend pas en compte la pondération par le flux adjoint. Mais comme il l'a été précisé dans la section précédente, ce cas précis de simulation permet de faire cette approximation. En effet, nous ne sommes pas dans le cas particulier de type : réacteur de petite taille à neutrons rapides et comportant des réflecteurs.

Noyau	Fission	$\beta(\text{pcm})$
$^{232}\text{Th}$	rapide	2433
$^{233}\text{U}$	thermique	296
$^{235}\text{U}$	thermique	679
$^{238}\text{U}$	rapide	1828
$^{239}\text{Pu}$	thermique	224
$^{240}\text{Pu}$	rapide	292
$^{241}\text{Pu}$	thermique	535

TAB. 5.1: Fractions des neutrons retardés pour quelques noyaux fissiles

Groupe	$\beta(\text{pcm})$	Temps de vie moyenne (s)
1	24	78.6
2	123	31.5
3	117	8.62
4	262	3.22
5	108	0.714
6	45	0.258
Moyenne	679	11.31

TAB. 5.2: Caractéristiques des neutrons retardés pour l' $^{235}\text{U}$  (cas d'une fission thermique)

compatible et transparente avec les méthodes déjà écrites dans MURE : comme l'évolution combustible et le couplage avec la thermohydraulique.

### 5.2.2 Méthode de pondération

La méthode la plus précise est bien entendu celle réalisée par exemple dans les codes déterministes : le calcul de  $\beta$  est pondéré par le flux adjoint et le spectre énergétique des neutrons retardés.

A l'heure actuelle, MCNP ne permet pas d'avoir accès au flux adjoint. Des modifications ont été développées corrigeant cette lacune, mais n'ont pas été utilisées ici[72]. Si leur incorporation est envisagée, il faudra s'assurer de leur compatibilité avec toutes les classes de MURE et avec les différentes versions de MCNP que MURE peut gérer.

### Méthode prompte

Une approche simplifiée avec MCNP consiste en l'estimation de  $\beta$  à l'aide de deux coefficients multiplicateurs :

$$\beta \sim 1 - \frac{k_p}{k} \quad (5.2)$$

Avec  $k_p$  la valeur du coefficient multiplicateur en ne prenant en compte que les neutrons prompts, qui est accessible avec l'emploi de la carte TOTNU NO[3]. Mais cette méthode néglige l'impact des neutrons retardés sur la forme du flux, et qui plus est, une nouvelle simulation MCNP est nécessaire. Certaines simulations nécessitent déjà des temps de calcul très longs, l'addition de cette étape est une réelle contrainte. De plus, cette méthode ne donne pas accès aux  $\beta_i$  pourtant nécessaires à la résolution des équations de la cinétique à plusieurs groupes de neutrons retardés.

### Méthode de calcul implémentée dans MURE

Une autre méthode, plus précise, a été implémentée dans MURE pour l'estimation du  $\beta^2$ . Elle utilise la discrétisation spatiale nécessaire dans les calculs couplés avec la thermohydraulique ou dans les études d'évolution combustible. A défaut d'avoir accès au flux adjoint, l'importance des neutrons est prise en compte au travers des taux de réaction de chaque noyau fissile en fonction du groupe énergétique et de la position spatiale.

$$\beta_i = \frac{\sum_c \sum_n \left( N_n \nu_{n,i}^d \langle \sigma_n^f \phi_c \rangle \right)}{\sum_c \sum_n \left( N_n \langle \nu_n \sigma_n^f \phi_c \rangle \right)} \quad (5.3)$$

et

$$\langle \nu_n \sigma_n^f \phi_c \rangle = \int \nu_{n,e} \sigma_{n,e}^f \phi_{c,e} dE \quad (5.4)$$

Avec :

- $c$  la  $i$ ème cellule (espace discrétisé),
- $n$  le  $n$ ème noyau fissile considéré,
- $i$  le  $i$ ème groupe de neutrons retardés (appelé aussi famille),
- $N$  le nombre de noyaux considérés,
- $\nu$  le nombre total de neutrons émis ( $\nu = \nu^p + \nu^d$ ),
- $\nu^d$  le nombre de neutrons retardés.

Un des avantages est que la seule intervention de l'utilisateur pour calculer la fraction de neutrons retardés, est l'appel de la méthode. En effet, une automatisation complète a été possible car toutes les données nécessaires au calcul sont disponibles au cours d'un calcul d'évolution combustible ou de couplage avec la thermohydraulique (discrétisation, tallies pour les taux de réaction, ...).

La seule valeur non calculée par MNCP est le nombre de neutrons retardés émis par noyau fissile. Or ces valeurs sont connues par noyau, et ne dépendent pas de l'énergie incidente du neutron qui a provoqué la fission (pour des vitesses de neutrons comparables à celles en réacteur[73, 74, 75]), c'est pourquoi il n'est pondéré que par l'intégrale des taux

---

<sup>2</sup>Nous parlons de  $\beta$  et non de  $\beta_{eff}$  dans le sens où notre calcul ne prend pas compte la pondération par le flux adjoint. En effet, on néglige la pondération par l'importance et la densité énergétique des neutrons de fission.

de réactions, à la différence du nombre total de neutrons émis après fission qui lui varie suivant le domaine énergétique.

Nous avons trouvé des valeurs de  $\nu^d$  en fonction de temps de décroissance constants (car en réalité ces temps varie suivant le précurseur[74]). Ce qui nous permet de calculer les  $\beta$  par famille pour un mélange de noyaux et d'obtenir ainsi des données utilisables pour les calculs de cinétique[74, 71]. Ainsi, à n'importe quel instant du cycle du réacteur, ou de conditions de fonctionnement, le calcul de la fraction de neutrons retardé est possible.

### Validation de la méthode

Le benchmark présente des résultats sur le calcul de la fraction de neutrons retardés, nous avons donc testé la méthode précédemment citée et également la méthode prompte.

Codes	Fraction de neutrons retardés (pcm)
CORETRAN	568
EPISODE	579
NUREC	576
PARCS 2G	579
SKETCH-INS	579
BARS	579
MCNP (TOTNU NO)	536
MURE / MCNP	566

TAB. 5.3: Calcul de la fraction de neutrons retardés

Le résultat avec la méthode prompte présente un écart important d'environ 40 pcm. L'importance des neutrons n'étant pas prise en compte, l'impact des neutrons retardés, qui ont des énergies thermiques, est minoé.

La méthode MURE / MCNP que nous avons implémenté présente un écart de 10 pcm avec ceux du benchmark. La pondération effectuée se rapproche de celle du flux adjoint, mais bien évidemment ne substitue pas à elle. Cependant les résultats sont dans des barres d'erreur acceptables pour les études de cinétiques menées actuellement.

Cette méthode donnant des résultats acceptables, elle peut être utilisée afin d'observer l'évolution de la fraction de neutrons retardés au cours de l'irradiation tout au long du cycle du réacteur. Ainsi, à n'importe quel instant, un transitoire peut être initié.

L'apparition de noyaux de plutonium au cours de l'irradiation par capture sur l' $^{238}\text{U}$  dégrade très nettement la fraction de neutrons retardés et rendent encore plus difficile le contrôle du réacteur : cf. figure 5.1 (calcul d'évolution combustible du cœur présenté dans le benchmark).

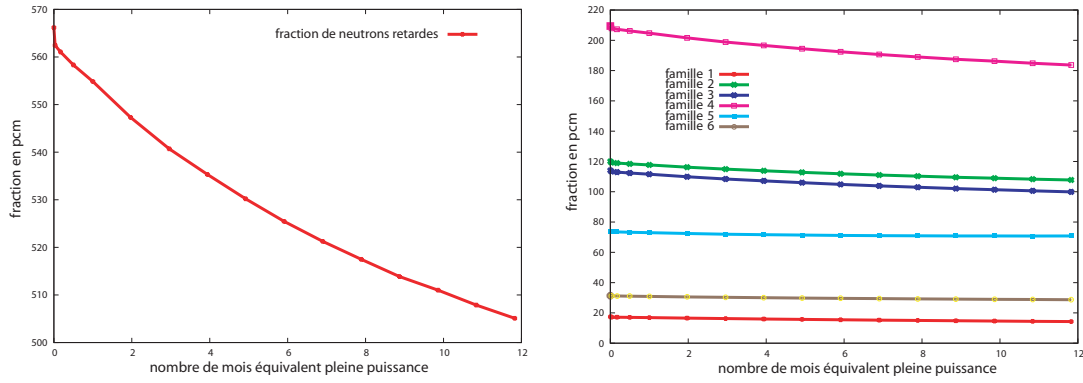


FIG. 5.1: Évolution de la fraction de neutrons retardés au cours du cycle

### 5.3 Résolution de la cinétique point avec contre-réactions thermiques

La résolution des équations de la cinétique point a été implémenté dans MURE. Son utilisation nécessite simplement la précision des données utiles au calcul et dépendantes du système : fraction de neutrons retardés, temps de génération des neutrons, coefficients doppler et de vide, nature de l'insertion de réactivité, ...

Les méthodes de résolution d'équations différentielles sont diverses mais certaines sont inadaptées dans notre cas. En effet les pas de temps vont dépendre du temps de génération effectif des neutrons. Une méthode de Newton explicite a été utilisée dans un premier temps, mais une méthode de résolution Runge Kutta d'ordre 4 a été préféré (celle-ci gère automatiquement les pas de temps en fonction du niveau de variation des résultats[40]).

#### 5.3.1 Equations de la cinétique point

L'équation représentant le suivi de la population de neutrons dans le cadre de la cinétique point s'écrit ainsi[76] :

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{\rho_{net}(t) - \beta}{\Lambda} N(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) + S \quad (5.5)$$

Avec :

- $i$  représente la  $i$ ème famille de neutrons retardés,
- $N(t)$  la population neutronique,
- $\rho_{net}(t)$  la réactivité du système telle que  $\rho_{net} = \rho_{ext} + \rho_{CR}$ ,
- $\rho_{ext}$  la réactivité externe (impact d'une barre de contrôle par exemple),
- $\rho_{CR}$  la réactivité des contre réactions (thermiques et effets de vidange),
- $\Lambda$  le temps de génération des neutrons,
- $\lambda_i$  est la constante de temps de décroissance pour le  $i$ ème groupe de neutrons retardés,
- $S$  est une source externe de neutrons,



- $C_i$  est la concentration de précurseurs du  $i$ ème groupe telle que

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} N(t) - \lambda_i C_i(t) \quad (5.6)$$

Ainsi, MURE nécessite de l'utilisateur la spécification des données suivantes :

- la réactivité externe,
- les coefficients de contre réactions doppler et de vide<sup>3</sup>,
- le temps de génération des neutrons.

Dans l'application présentée dans la section 5.4, ces données ont été recalculées par MURE au travers de simulations MCNP.

### 5.3.2 Modèle LUMP pour les contre réactions thermiques

Un modèle simplifié pour la modélisation des transferts thermiques est couplée à la résolution des équations de la cinétique[77].

Traitement des échanges des dépôts de puissance et échanges de chaleur entre le combustible, la gaine et le caloporteur :

$$C_f \frac{dT_f}{dt} = \psi - h_{fs}(T_f - T_s) \quad (5.7)$$

$$C_s \frac{dT_s}{dt} = h_{fs}(T_f - T_s) - h_{sc}(T_s - T_c) \quad (5.8)$$

$$C_c \frac{dT_c}{dt} = h_{sc}(T_s - T_c) - C_c \left( v \frac{\partial T_c}{\partial z} \right) \quad (5.9)$$

Avec :

- l'indice  $f$  pour le combustible,
- l'indice  $s$  pour la gaine,
- l'indice  $c$  pour le caloporteur,
- $C$  la capacité calorifique ( $J/m/K$ ),
- $T$  la température ( $K$ ),
- $\psi$  la puissance linéique ( $W/m$ ),
- $v$  la vitesse du caloporteur ( $m/s$ ),
- $v \frac{\partial T_c}{\partial z} = (T_c^{sortie} - T_c^{entrée}) \frac{\bar{v} \cdot Section}{Volume}$ , en effet, c'est une modélisation de la cinétique en 0D ; l'élévation de température du caloporteur dans la colonne n'est pas calculé de manière discrète,
- $h_{fs}$  la conductance thermique entre la pastille combustible et la gaine ( $W/m/K$ ) telle que :

$$\frac{1}{h_{fs}} = \frac{1}{2h_1} + \frac{1}{h_2} + \frac{1}{2h_3} \quad (5.10)$$

---

<sup>3</sup>En effet, c'est à partir de ces coefficients que les contre réactions sur la réactivité sont calculées. Par exemple, dans l'étude d'éjection de barres du benchmark, nous avons calculé avec MCNP un coefficient Doppler de  $-3 \text{ pcm/K}$ . Ainsi la contre réaction sur la réactivité à chaque pas de temps  $\Delta t$  vaudra :  $\rho_{CR}^{doppler} = -3 * \Delta T_{\Delta t}$ .

- $h_{sc}$  la conductance thermique entre la gaine et le caloporteur ( $W/m/K$ ) telle que :

$$\frac{1}{h_{sc}} = \frac{1}{2h_3} + \frac{1}{2h_4} \quad (5.11)$$

Les constantes  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $h_3$ , et  $h_4$  sont définies ainsi :

$$h_1 = 4\pi K_f \quad (5.12)$$

$$h_2 = 2\pi a h_b \quad (5.13)$$

$$h_3 = \frac{4\pi K_s}{\ln\left(\frac{c}{b}\right)} \quad (5.14)$$

$$h_4 = 2\pi c h_c \quad (5.15)$$

Avec :

- $K_f$  la conductivité thermique moyenne du combustible ( $W/m/K$ ),
- $K_s$  la conductivité thermique moyenne de la gaine ( $W/m/K$ ),
- $h_b$  la conductance thermique de la lame de gaz ( $W/K$ )
- $h_c$  le coefficient de transfert thermique entre le caloporteur et la gaine ( $W/m^2/K$ ),
- $a$  le rayon de la pastille combustible ( $m$ ),
- $b$  le rayon interne de la gaine ( $m$ ),
- $c$  le rayon externe de la gaine ( $m$ ).

Après détermination des conditions initiales pour les températures des différentes structures et la concentration de précurseurs, la matrice des équations différentielles couplées est résolue par une méthode Runge Kutta d'ordre 4.

## 5.4 Application à l'accident d'éjection de barres

Le benchmark présente les résultats de simulation sur un accident d'éjection de barre. Nous avons testé la possibilité de simuler cet accident avec le module de cinétique point de MURE, tout en sachant à l'avance que les résultats seraient peu précis mais en espérant quand même un certain réalisme.

Les conditions initiales sont celles du calcul à puissance nulle du chapitre précédent avec les barres de contrôle insérées. Les données nécessaires à la résolution des équations de cinétique ont été calculées avec MURE et sont présentées dans le tableau 5.4. Seule la valeur de la fraction de neutrons retardés était spécifiée dans le benchmark et commune à tous les codes. Nous avons donc effectué nos simulations avec cette valeur, et non pas avec celle que nous avons calculé avec MURE.

L'éjection des barres de contrôle de l'assemblage E5 s'étend sur 0.1 s alors que les grappes d'arrêt d'urgence restent en dehors du cœur. L'approximation d'un prompt jump a été faite. Dans les figures 5.2, 5.3, 5.4, les résultats de la simulation sur l'évolution de la

Paramètres	Valeur
Approximation d'un prompt jump à 0.1s	1.07 \$
Temps de génération	12.6 $\mu s$
Fraction de neutrons retardées	579 pcm
Coefficient Doppler	-3 pcm/K

TAB. 5.4: Constantes neutroniques pour la résolution des équations de cinétique

réactivité, la puissance et la température moyenne du combustible dans l'assemblage E5 sont comparés à ceux du benchmark.

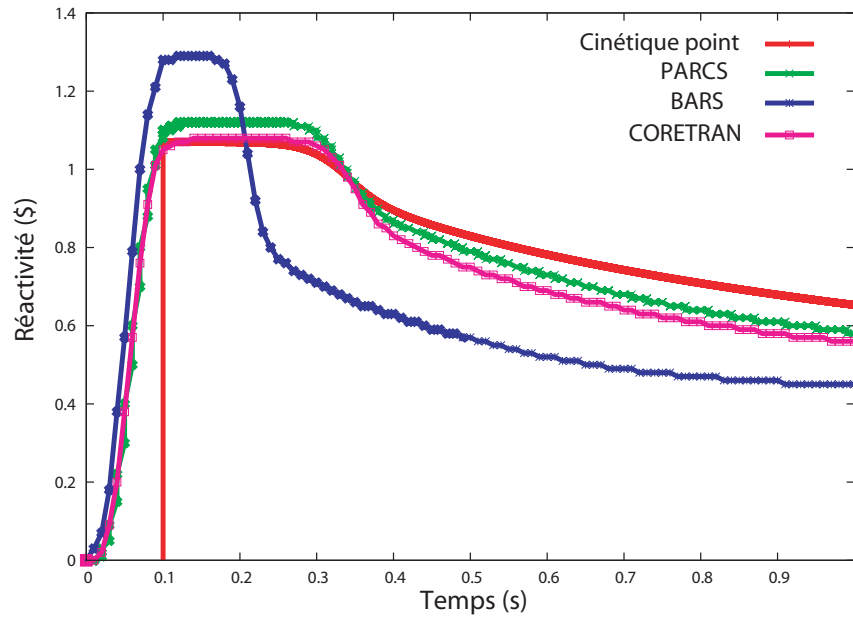


FIG. 5.2: Évolution de la réactivité au cours du transitoire

Compte tenu du fait que nous faisons l'approximation de la cinétique point dans un réacteur de grande taille à spectre thermique, les résultats que nous obtenons sont en réalité locaux. Sachant cela, les paramètres d'entrée thermohydrauliques pour le modèle de contre réaction sont spécifiques à l'assemblage sur lequel se produit l'incident. Ainsi l'approximation spatiale induite par la modélisation "point" n'est plus à l'échelle du cœur mais de l'assemblage ; celle-ci est valable dans le sens où l'accident se déroule sur un temps très court, et donc les perturbations majeures sont localisées sur l'assemblage. La conséquence directe est donc une surestimation de l'augmentation de la puissance finale, puisque seul l'assemblage E5 est réellement simulé. L'effet tampon des autres assemblages n'est pas pris en compte. C'est une des raisons pour laquelle la puissance finale obtenue par la simulation en cinétique point est 60% plus élevée que dans les conditions initiales, à comparer aux 20% d'augmentation calculés par les codes de cinétique spatiale du benchmark.

Une autre raison à cet écart de puissance finale, et sur celui du pic de puissance, repose

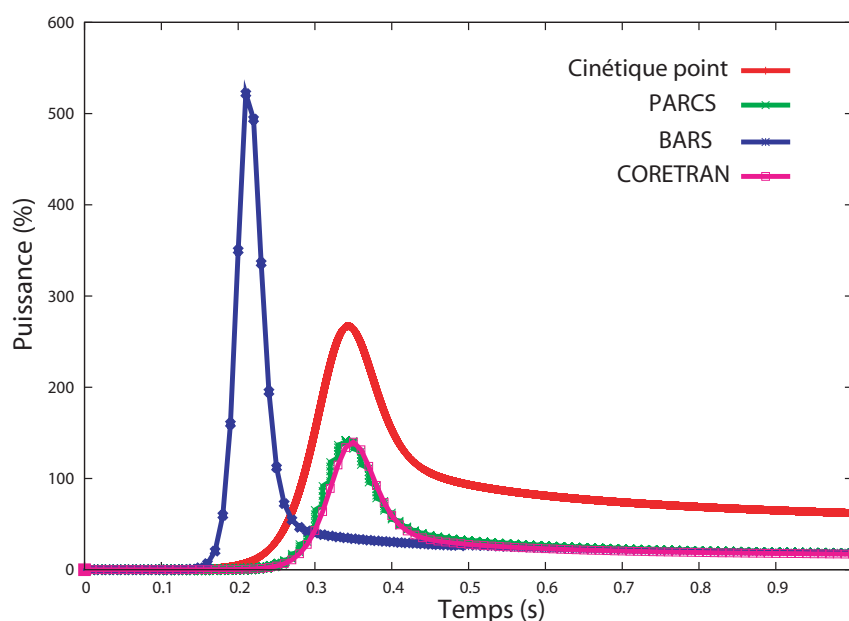


FIG. 5.3: Évolution de la puissance au cours du transitoire

sur la détermination des contre réactions par effet Doppler et par effet de vide. En effet, nous avons calculé de par des simulations MURE / MCNP un coefficient doppler de -3 pcm/K. Mais les résultats présentés dans le benchmark font état d'un coefficient bien plus élevé (au moins le double). Cet aspect contribue aux écarts de puissance finale observés, et également dans le surplus de réactivité observé en fin de simulation.

En revanche, l'évolution de la température du combustible est en accord avec les autres simulations, ce qui semble indiquer que les modèles thermohydrauliques, y compris les propriétés thermodynamiques, présentent des différences.

Le pic de puissance est atteint à  $0.32\text{ s} \pm 0.02$ . Cela indique que les temps de génération sont du même ordre de grandeur.

En conclusion, la cinétique point donne accès à des tendances acceptables sur l'évolution de transitoires. Ces simulations n'ont pas la prétention de faire office d'une étude de sûreté, mais permettent facilement d'observer l'allure d'excursions de criticité. En revanche, il est nécessaire de prêter attention au cas simulé. En effet, comme nous l'avons souligné dans cette modélisation d'accident d'éjection de barre en REP, la prise en compte du cœur entier pour la cinétique point est impossible. De même, cette simulation reste réaliste car il s'agit d'un accident rapide. Pour une même configuration de cœur, un accident de type LOCA<sup>4</sup> n'aurait pas été réalisable, car les perturbations induites par un tel accident sont globales (et non uniformes) et non plus locales. Par contre ce même accident en spectre rapide peut être simulé avec l'approximation de la cinétique point[65] (moyennant la simulation des échangeurs avec le circuit secondaire).

<sup>4</sup>Loss Of Coolant Accident - brèche dans le circuit primaire : perte du réfrigérant

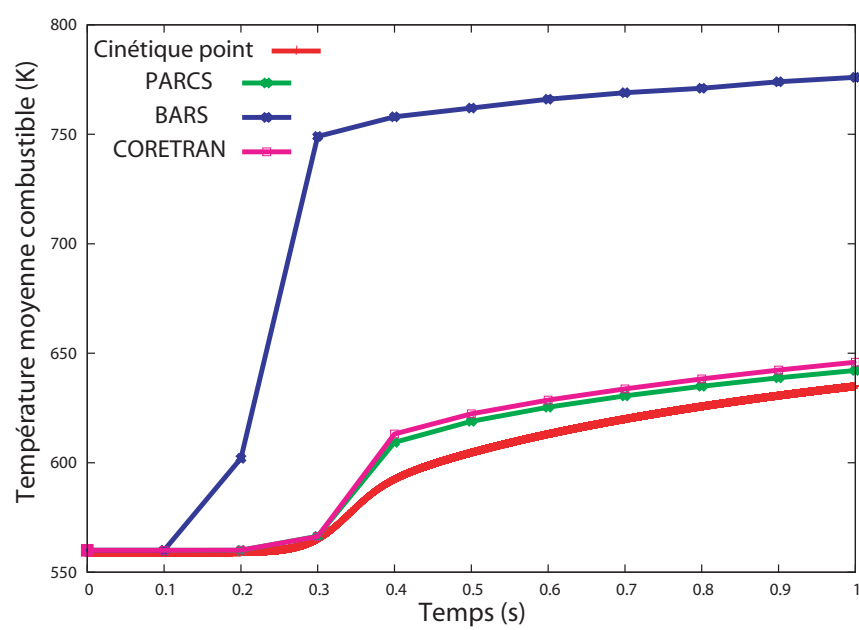


FIG. 5.4: Évolution de la température du combustible au cours du transitoire

# Conclusion et perspectives

Cette thèse a débuté par un travail de recherche sur la capacité de fournir des outils de simulation appropriés à l'investigation de filières innovantes de réacteurs nucléaires. Plusieurs codes de thermohydraulique ont été testés afin de sélectionner celui qui sera le plus à même de répondre au cahier des charges que nous nous étions imposés, à savoir la conservation du caractère générique du code MURE. Cependant, la spécificité des codes a fait que celui retenu est qualifié pour les écoulements en eau et non pour tout type de caloporteur. Même si l'extension du code COBRA pour la simulation des caloporteurs en sodium liquide est possible. C'est la raison pour laquelle le code BATH a été implémenté dans MURE, afin de préserver la capacité de simuler n'importe quel type de technologie innovante (de par l'utilisation en neutronique d'un code de transport Monte Carlo). Malgré sa résolution en 2D RZ des équations de thermohydraulique, il assure la fonctionnalité de MURE pour des simulations couplées neutronique thermohydraulique dans les cas, par exemple, de réacteurs rapides refroidis au sodium qui ont une place privilégiée au sein des réacteurs de quatrième génération.

La validation du schéma couplé MURE-MCNP-COBRA a été réalisé sur un cas très complexe présentant tout l'intérêt des simulations en trois dimensions. Elle est encourageante en termes de faisabilité, mais cependant, ce travail de validation doit être approfondi car tous les écarts observés entre les résultats fournis par les différents outils de calcul considérés ne sont pas expliqués de manière satisfaisante. Une étude de cas plus simples doit être menée. Puis par augmentation progressive de la complexité, les écarts observés entre les codes pourraient être ainsi mieux compris et donc expliqués. Par ailleurs, l'étude rigoureuse de la convergence de ce type de calcul couplé reste à faire, avec la perspective d'aboutir à une estimation des incertitudes sur les grandeurs calculées dues aux incertitudes statistiques provenant du calcul de transport Monte Carlo.

Par conséquent, l'exploitation d'un tel couplage doit être faite avec la plus grande prudence, en portant notamment attention à la nature des études visées et aux incertitudes cibles associées. Une maîtrise de la convergence des calculs doit être assurée et ainsi qu'une évaluation des incertitudes.

En termes de développement, la nécessité de réaliser un couplage avec une interface homme machine simple a été respectée. En effet, la simplification des jeux de données d'entrée n'a pas été négligée. Elle autorise l'usage du schéma couplé dans un cadre convivial comparable à l'utilisation initiale de MURE pour des simulations neutroniques, voire

encore plus allégée. Ainsi la création de jeux d'entrée pour un cœur complet incluant un couplage avec la thermohydraulique se limite à quelques centaines de lignes de code, qui consistent en une description factuelle de la géométrie et des conditions de fonctionnement. Les communications entre les codes, ainsi que les échanges de données sont traitées automatiquement, offrant ainsi à l'utilisateur un gain de temps non négligeable.

Ces méthodes développées au sein du travail de thèse permettent un accès rapide et simple à des modélisations qui ne le sont pas : la simulation en trois dimensions de réacteurs nucléaires avec un couplage neutronique thermohydraulique. Les applications possibles actuellement, sont l'accès à une description locale très réaliste des cœurs de réacteurs pour des calculs à puissance nominale. Ceux-ci permettent notamment de s'assurer de la tenue des critères de sûreté :

- en terme de températures dans les structures tout au long de la période d'irradiation,
- de l'estimation des grandeurs de cinétique (temps de génération des neutrons, fraction de neutrons retardés, ...),
- ou de tout autre paramètre dont l'accès a été rendu possible par une modélisation fine et couplée.

Ainsi, le travail réalisé permet la simulation dans des conditions statiques. Mais l'exploration de nouvelles possibilités technologiques et de design de réacteurs nucléaires nécessite également des simulations dynamiques. C'est la raison pour laquelle, une méthode de résolution de la cinétique point avec contre-réactions thermiques a été ajoutée au code MURE. Cependant, elle n'est pas suffisante pour des études de transitoires et surtout ne permet pas une modélisation aussi fine que celle apportée par le travail déjà réalisé. C'est pourquoi, dans un souci d'excellence et de cohérence, le couplage du code MURE avec un code de cinétique 3D est l'une des prochaines étapes. Celui-ci permettra de prendre en considération des effets locaux qui ne sont pas accessibles en l'état actuel du développement.

Par contre cette nouvelle brique ne permettra pas la simulation de certains accidents, comme par exemple une brèche dans le circuit secondaire. En effet, rappelons que COBRA ne simule que le cœur du réacteur. Ainsi, l'ajout d'un code de cinétique 3D devra être suivi d'un couplage avec un code système de type CATHARE, afin de maintenir une cohérence avec les efforts déjà fournis. En effet, des tests de modélisation des circuits secondaires avec échangeurs ont été initiés, mais l'emploi d'un code qualifié est préférable.

Néanmoins, aussi complet que pourra être l'outil MURE, même si toutes les disciplines qui interviennent dans un réacteur nucléaire sont incluses, il ne faut pas perdre de vue que cela reste une représentation numérique de la physique mise en jeu. Tous les codes, indépendamment les uns des autres, ne permettent pas une modélisation parfaite et formellement exacte des phénomènes réels. De plus, du fait du couplage, des erreurs systématiques s'ajouteront aux autres incertitudes ou approximations. C'est la raison pour laquelle, un recul est toujours nécessaire par rapport aux résultats obtenus. Les simulations numériques ne se substitueront jamais aux validations expérimentales. Et plus précisément pour les études

de sûreté, des marges de sécurité raisonnables devront toujours être maintenues, même si ce type de calculs couplés permettront de les réduire.





# ANNEXES



## Annexe A

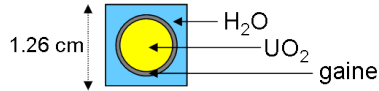
# Effet de couplage entre cellules dans une géométrie discrétisée - mise en évidence au cours d'un calcul d'évolution combustible

Une étude sur le couplage entre cellules évoqué dans le chapitre 3, section 3.6.5 a été réalisé par Olivier Méplan (LPSC Grenoble) et présenté lors d'une communication interne. La simulation porte sur un crayon combustible de type REP découpé axialement, et met en évidence le découplage entre cellules dans le cas de géométries discrétisées. Tous les calculs ont été effectués à statistique constante, et portent sur des évolutions combustibles.

Que ce soit pour le suivi d'une grandeur globale (le coefficient multiplicateur) ou de grandeurs locales (les flux de chaque cellule), le choix de la statistique et surtout de la manière dont est réalisé la simulation ont un impact très important. En effet, comme nous pouvons le constater sur les figures A.1 et A.2, il est nécessaire d'avoir un nombre de particules par cycle suffisamment important afin de prendre en compte les rares histoires longues de neutrons. Dans le cas contraire, et même pour une statistique globale conséquente, des phénomènes d'oscillations non physiques apparaissent et induisent des erreurs systématiques. Ainsi, les grandeurs principalement locales sont erronées et donc inexploitable.

• Faibles corrélation : Choix du nombre de particules par cycle

- Crayon REP ( $H = 3.66\text{m}$ ,  $r_{\text{fuel}} = 0.41\text{ cm}$ ) ouvert aux extrémités
- 21 zones de  $17.4\text{ cm}$
- Temps entre 2 calculs MCNP: 30 jours
- $P_{\text{th}} = 75\text{ kW}$



Statistique: 20 000 000 neutrons

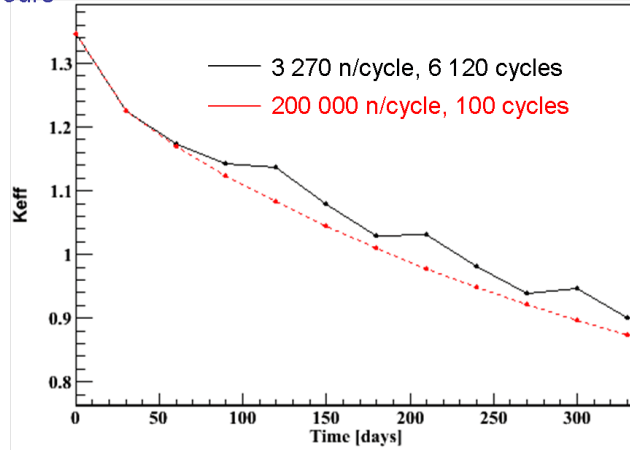


FIG. A.1: Cadre de simulation : calculs à statistique constante

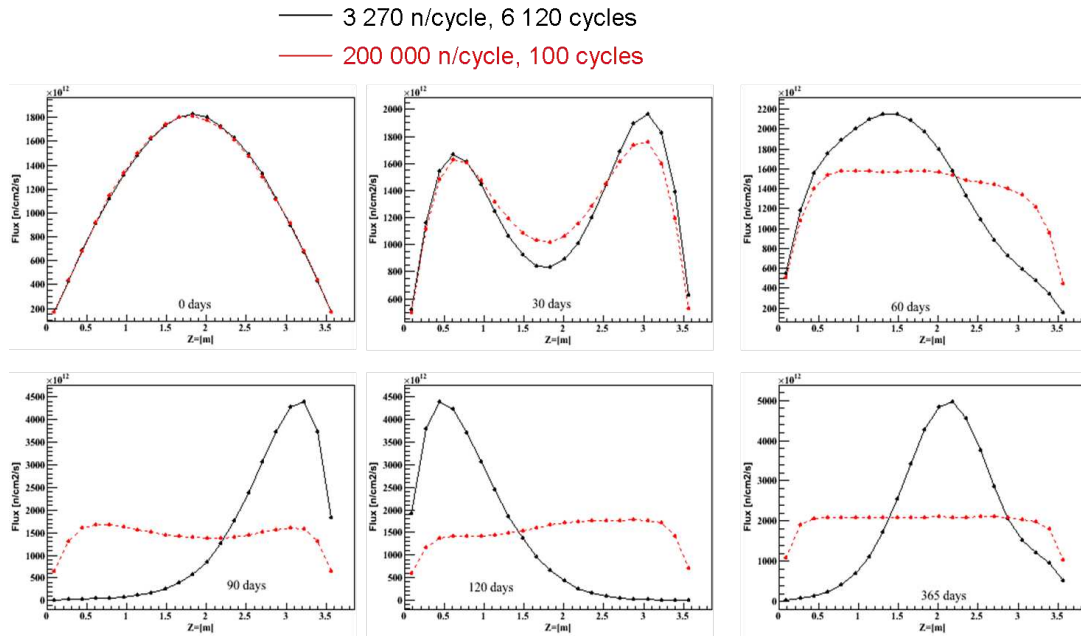


FIG. A.2: Impact des critères de simulation sur les profils de flux au cours de l'irradiation

## Annexe B

# Benchmark : résultats des calculs 3D à puissance nominale

Dans les annexes C, D et E sont présentés les résultats détaillés des simulations du benchmark NEA[54] afin de permettre une comparaison complète avec d'autres calculs. Cependant, pour des raisons évidentes de lisibilité et d'économie, les résultats crayon par crayon ne sont pas fournis dans ce document.

### Résultats moyens par assemblage

Pour rappel, les comparaisons des dépôts de puissance radiaux sont disponibles dans la figure B.1.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.09	1.37	1.19	1.37	1.01	1.12	1.12	0.49
B	1.37	1.25	1.07	1.2	1.3	0.97	1.11	0.58
C	1.19	1.07	1.17	1.33	1.21	1.19	1.11	0.48
D	1.37	1.2	1.33	1.07	1.29	1.18	1.01	0.4
E	1.01	1.3	1.21	1.29	0.93	1.12	0.64	
F	1.12	0.97	1.19	1.18	1.12	0.84	0.32	
G	1.12	1.11	1.11	1.01	0.64	0.32		
H	0.49	0.58	0.49	0.4				

Calcul de référence

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.05	1.48	1.40	1.5	1.01	1.07	1.04	0.45
B	1.48	1.32	1.19	1.26	1.29	0.95	1.04	0.54
C	1.41	1.2	1.25	1.35	1.22	1.14	1.01	0.44
D	1.53	1.28	1.36	1.02	1.23	1.1	0.93	0.37
E	1.04	1.33	1.24	1.24	0.88	1.03	0.59	
F	1.1	0.98	1.18	1.12	1.04	0.76	0.31	
G	1.08	1.08	1.05	0.95	0.61	0.31		
H	0.47	0.57	0.46	0.38				

Calcul MURE

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	-3.9	8.3	18.0	9.2	0.3	-4.7	-7.0	-7.6
B	8.4	6.0	11.6	4.7	-0.5	-2.4	-6.4	-7.2
C	18.7	12.5	6.8	1.1	0.7	-3.8	-8.7	-8.3
D	11.7	6.7	1.9	-5.1	-4.6	-7.1	-8.3	-7.0
E	3.3	2.1	3.0	-3.5	-5.5	-8.1	-7.2	
F	-1.9	1.2	-1.4	-5.2	-7.0	-9.2	-2.9	
G	-3.4	-2.7	-5.7	-6.3	-5.3	-2.1		
H	-3.9	-2.6	-4.3	-4.0				

Ecart en %

FIG. B.1: Comparaison des dépôts de puissance radiaux (HFP)

Code	% PWE
nodal	
CORETRAN	0.31
EPISODE	0.4
NUREC	0.31
PARCS 2G	ref
PARCS 4G	0.31
PARCS 8G	0.55
SKETCH-INS	1.04
hétérogène	
MURE	5.83
TORT-TD/CTF[64]	13.89

TAB. B.1: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage (HFP)

	Assemblage					
	A1	B2	C3	D4	E5	F6
nodal						
CORETRAN	1.07	0.92	0.90	2.62	1.38	4.60
EPISODE	3.08	2.67	3.01	3.47	3.44	10.47
NUREC	0.08	0.17	0.24	0.32	0.13	0.89
PARCS	ref	ref	ref	ref	ref	ref
SKETCH-INS	0.09	0.11	0.18	0.58	0.22	0.87
hétérogène						
MURE	1.7	2.36	2.36	1.9	1.65	7.53

TAB. B.2: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon (HFP)

Cependant une comparaison des résultats de thermohydraulique avec ceux des codes du benchmark n'a pas été réalisée compte tenu de la disparité très importante entre les résultats du benchmark. Cela s'explique par l'emploi de modèles thermohydrauliques très différents. Dans un souci de clarté, seuls les résultats qui sont eux même disponibles dans le benchmark ont été présentés. Par exemple, les profils de température dans chaque crayon obtenus par les calculs couplés MURE-MCNP-COBRA ne sont pas disponibles dans ce manuscrit.

926	1109	1074	1115	912	935	924	702
1110	1041	986	1013	1028	886	923	732
1079	990	1009	1050	997	966	912	698
1129	1023	1056	914	1002	946	892	675
924	1043	1008	1007	859	919	752	
947	900	979	955	924	815	655	
940	940	927	886	756	656		
709	742	706	679				

TAB. B.3: Températures moyennes du combustible par assemblage (K)

1436	1753	1695	1759	1345	1423	1350	872
1755	1665	1517	1583	1579	1302	1361	949
1707	1527	1602	1622	1540	1490	1338	870
1789	1605	1634	1414	1521	1432	905	818
1375	1611	1565	1533	1247	1336	992	
1452	1333	1519	1455	1347	1309	770	
1386	1400	1369	1290	1002	771		
886	971	889	829				

TAB. B.4: Températures maximales du combustible par assemblage (K)



575.7	581.6	580.5	581.8	575.2	576.0	575.6	567.1
581.6	579.5	577.7	578.6	579.1	574.3	575.6	568.4
580.7	577.9	578.5	579.8	578.1	577.1	575.2	566.9
582.2	578.9	580.0	575.3	578.2	576.4	599.2	565.8
575.7	579.5	578.4	578.4	573.4	575.5	569.2	
576.5	574.8	577.5	576.7	575.6	571.7	564.9	
576.2	576.2	575.7	574.3	569.4	564.9		
567.4	568.8	567.3	566.0				

TAB. B.5: Températures moyennes du caloporteur par assemblage (K)

720.25	697.79	703.23	696.93	721.54	719.43	720.48	741.18
697.74	707.63	714.34	711.22	709.44	723.96	720.56	738.32
702.52	713.90	711.69	706.59	713.16	716.33	721.52	741.59
694.47	710.00	705.79	721.43	712.65	718.45	660.45	743.84
720.42	707.59	711.94	711.97	726.43	720.94	736.45	
718.20	722.71	714.99	717.54	720.47	730.51	745.82	
719.00	719.02	720.22	723.99	736.03	745.75		
740.59	737.41	740.79	743.44				

TAB. B.6: Densités moyennes du caloporteur par assemblage ( $kg/m^3$ )

603.7	618.5	615.9	618.9	602.4	604.5	603.5	580.2
618.6	613.4	608.9	611.1	612.3	600.0	603.4	583.8
616.3	609.3	610.8	614.1	609.8	607.2	602.4	579.6
619.9	611.9	614.5	602.5	610.2	605.5	599.2	576.7
603.5	613.5	610.7	610.7	597.4	603.0	586.1	
605.6	601.3	608.3	606.3	603.5	592.8	574.0	
604.9	604.9	603.7	600.0	586.6	574.1		
580.9	584.9	580.7	577.2				

TAB. B.7: Températures du caloporteur en sortie par assemblage (K)

645.36	515.31	547.63	510.37	650.02	641.73	646.53	712.42
515.08	574.51	615.98	596.63	585.77	657.89	646.78	703.56
543.29	613.30	599.61	568.19	608.91	626.60	649.98	713.66
496.76	589.16	563.25	649.63	605.57	639.00	660.45	720.55
646.37	574.38	601.22	601.45	665.88	648.02	697.72	
636.01	653.82	619.13	634.46	646.52	678.83	726.60	
641.61	641.26	645.67	657.97	696.40	726.36		
710.57	700.76	711.20	719.34				

TAB. B.8: Densités du caloporteur en sortie par assemblage ( $kg/m^3$ )

## Annexe C

# Benchmark : résultats des calculs 2D à températures fixées

Dans les annexes C, D et E sont présentés les résultats détaillés des simulations du benchmark NEA[54] afin de permettre une comparaison complète avec d'autres calculs. Cependant, pour des raisons évidentes de lisibilité et d'économie, les résultats crayon par crayon ne sont pas fournis dans ce document.

### Résultats moyens par assemblage

Pour rappel, les comparaisons des dépôts de puissance radiaux sont disponibles dans la figure C.1.

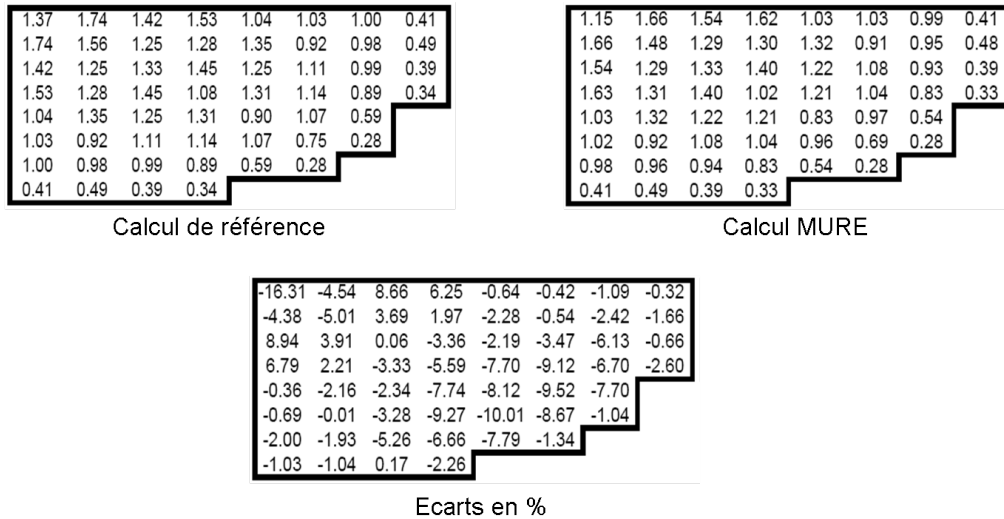


FIG. C.1: Comparaison des dépôts de puissance radiaux à températures fixées (calcul 2D)

Code	% PWE	Coefficient multiplicateur
nodal		
CORETRAN 1/FA	1.06	1.06387
CORETRAN 4/FA	0.96	1.06379
EPISODE	0.96	1.06364
NUREC	0.96	1.06378
PARCS 2G	0.96	1.06379
PARCS 4G	0.90	1.06376
PARCS 8G	0.86	1.06354
SKETCH-INS	0.97	1.06379
hétérogène		
BARS	1.29	1.05826
DeCART	ref	1.05852
DORT	0.86	1.06036
MCNP	0.67	1.05699
MURE	4.58	1.05759

TAB. C.1: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par assemblage et du coefficient multiplicateur (calcul 2D)

	Assemblage					
	A1	B2	C3	D4	E5	F6
nodal						
CORETRAN	0.85	1.05	0.91	2.37	1.38	4.89
EPISODE	0.25	0.23	0.42	1.37	0.47	4.04
NUREC	0.24	0.22	0.31	0.67	0.32	0.87
PARCS	0.28	0.21	0.29	0.54	0.32	0.51
SKETCH-INS	0.22	0.22	0.32	0.71	0.32	1.05
hétérogène						
BARS	0.26	0.45	0.55	0.40	0.33	0.61
DeCART	ref	ref	ref	ref	ref	ref
DORT	1.52	0.59	0.92	0.33	1.64	0.41
MURE	1.93	2.78	1.82	2.07	1.97	8.11

TAB. C.2: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon à températures fixées (calcul 2D)

## **Annexe D**

# **Benchmark : résultats des calculs 3D à puissance nulle et barres de contrôle insérées**

Dans les annexes C, D et E sont présentés les résultats détaillés des simulations du benchmark NEA[54] afin de permettre une comparaison complète avec d'autres calculs. Cependant, pour des raisons évidentes de lisibilité et d'économie, les résultats crayon par crayon ne sont pas fournis dans ce document.

### **Résultats moyens par assemblage**

Pour rappel, les comparaisons des dépôts de puissance radiaux sont disponibles dans la figure D.1.

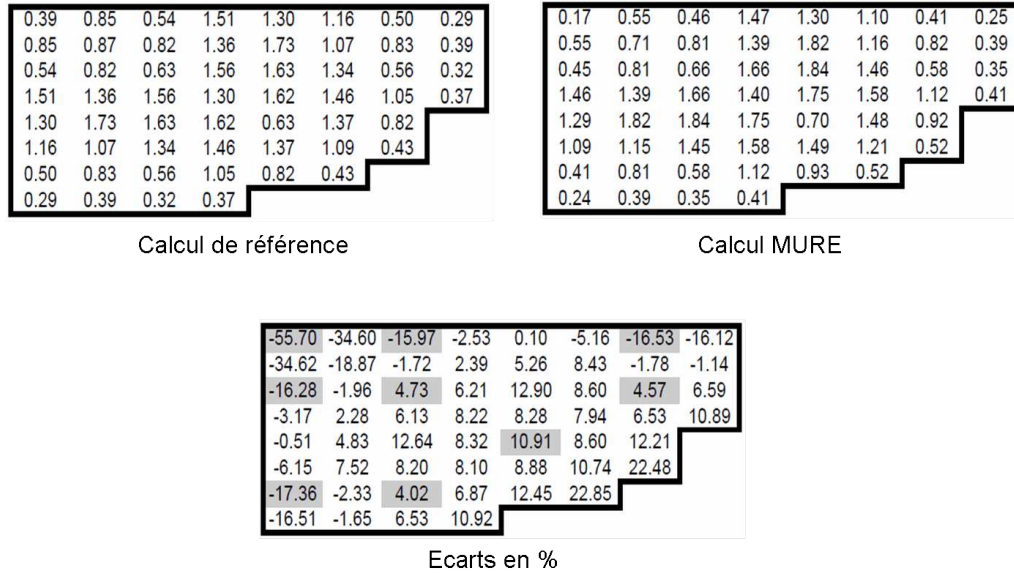


FIG. D.1: Comparaison des dépôts de puissance radiaux (HZP)

Code	% PWE
nodal	
CORETRAN 1/FA	1.26
CORETRAN 4/FA	1.09
EPISODE	1.05
NUREC	1.05
PARCS 2G	1.05
PARCS 4G	1.11
PARCS 8G	1.20
SKETCH-INS	1.06
hétérogène	
BARS	2.65
DeCART	ref
MURE	8.63

TAB. D.1: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance (HZP)

	Assemblage					
	A1	B2	C3	D4	E5	F6
nodal						
CORETRAN	6.46	0.81	6.66	3.44	6.71	4.81
EPISODE	2.51	0.57	2.33	1.41	2.39	3.88
NUREC	2.38	0.68	2.14	0.64	2.33	0.80
PARCS	/	0.82	/	0.62	/	0.46
SKETCH-INS	2.65	0.70	2.65	0.80	2.79	1.09
hétérogène						
BARS	0.38	0.60	1.83	0.33	0.41	0.45
DeCART	ref	ref	ref	ref	ref	ref
MURE	7.9	5.25	8.79	1.9	7.5	7.09

TAB. D.2: Comparaison des écarts pondérés entre les codes sur les dépôts de puissance par crayon (HZP)



## Annexe E

# Données de base pour les calculs automatisés de la fraction de neutrons retardés

Le nombre de neutrons retardés émis par fission pour chaque isotope est donné en fonction de groupes de décroissance constants (indépendants des isotopes). Ces données[74, 71] permettent donc le calcul de la fraction de neutrons retardés par famille pour un mélange de noyaux. L'application directe est la possibilité de réaliser des études de sûreté.

### Groupes de décroissance

Groupe	Constante de décroissance ( $s^{-1}$ )	Incertitude ( $s^{-1}$ )
1	0.0129	$\pm 0.0002$
2	0.0311	$\pm 0.0005$
3	0.134	$\pm 0.003$
4	0.331	$\pm 0.012$
5	1.26	$\pm 0.12$
6	3.21	$\pm 0.26$

TAB. E.1: Constantes de décroissance des précurseurs par groupe (indépendants des isotopes)



**Uranium 233**

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{\text{neutrons}}{\text{fission}} \cdot 100$	Incertitude
1	0.053	$\pm 0.003$
2	0.197	$\pm 0.012$
3	0.175	$\pm 0.025$
4	0.212	$\pm 0.013$
5	0.047	$\pm 0.014$
6	0.016	$\pm 0.006$

TAB. E.2: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{233}\text{U}$ **Uranium 235**

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{\text{neutrons}}{\text{fission}} \cdot 100$	Incertitude
1	0.060	$\pm 0.005$
2	0.364	$\pm 0.013$
3	0.349	$\pm 0.024$
4	0.628	$\pm 0.015$
5	0.179	$\pm 0.014$
6	0.070	$\pm 0.005$

TAB. E.3: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{235}\text{U}$ **Uranium 238**

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{\text{neutrons}}{\text{fission}} \cdot 100$	Incertitude
1	0.049	$\pm 0.005$
2	0.540	$\pm 0.027$
3	0.681	$\pm 0.092$
4	1.526	$\pm 0.096$
5	0.836	$\pm 0.033$
6	0.488	$\pm 0.036$

TAB. E.4: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{238}\text{U}$

## Thorium 232

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{\text{neutrons}}{\text{fission}} \cdot 100$	Incertitude
1	0.143	$\pm 0.012$
2	0.776	$\pm 0.046$
3	0.843	$\pm 0.099$
4	2.156	$\pm 0.103$
5	0.838	$\pm 0.053$
6	0.204	$\pm 0.034$

TAB. E.5: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{232}\text{Th}$

## Plutonium 239

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{\text{neutrons}}{\text{fission}} \cdot 100$	Incertitude
1	0.024	$\pm 0.002$
2	0.176	$\pm 0.009$
3	0.136	$\pm 0.014$
4	0.207	$\pm 0.012$
5	0.065	$\pm 0.007$
6	0.022	$\pm 0.003$

TAB. E.6: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{239}\text{Pu}$

## Plutonium 240

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{\text{neutrons}}{\text{fission}} \cdot 100$	Incertitude
1	0.028	$\pm 0.003$
2	0.237	$\pm 0.016$
3	0.162	$\pm 0.046$
4	0.314	$\pm 0.038$
5	0.106	$\pm 0.026$
6	0.039	$\pm 0.008$

TAB. E.7: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{240}\text{Pu}$

**Plutonium 241**

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{neutrons}{fission} \cdot 100$	Incertitude
1	0.019	$\pm 0.004$
2	0.369	$\pm 0.010$
3	0.276	$\pm 0.045$
4	0.534	$\pm 0.089$
5	0.310	$\pm 0.043$
6	0.032	$\pm 0.007$

TAB. E.8: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{241}\text{Pu}$ **Plutonium 242**

Groupe	$\nu_{dki}, \frac{neutrons}{fission} \cdot 100$	Incertitude
1	0.036	$\pm 0.013$
2	0.263	$\pm 0.086$
3	0.270	$\pm 0.075$
4	0.607	$\pm 0.177$
5	0.279	$\pm 0.055$
6	0.145	$\pm 0.059$

TAB. E.9: Nombre de neutrons retardés émis par fission à 6 groupes pour l' $^{242}\text{Pu}$


## Annexe F

# Exemple d'un jeu de données MURE


Ci-après sont présentés quelques exemples d'utilisation du code MURE[1, 2, 38].  
La figure F.1 présente quelques formes de base implémentées dans le code MURE.

- 4 Shapes de base

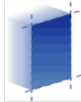
- Cylinder ( $\infty$ )




- Sphere



- Plane ( $1/2 \infty$ )




- Brick




- Union/Intersection de Shapes: les Nodes

- Tube



- Hexagon



- Création d'objets

```
Shape_ptr S(new Sphere(R,x,y,z));  
Shape_ptr B(new Brick(a/2,b/2,c/2));
```

- Manipulation

```
B->Translate(dx,dy,dz);  
double center[3]={x0,y0,z0};  
B->Rotate(phi,theta,psi,center);  
B>>S;
```

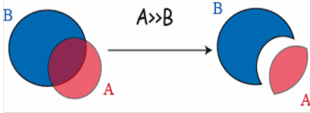


FIG. F.1: Gestion de la géométrie dans MURE

Une fois les structures géométriques créées, la construction d'une cellule consiste en l'association d'une structure (shape) et d'un matériau (cf. figure F.2).

Ainsi, comme présenté dans la figure F.3, la construction d'un réseau (simple) se limite à quelques lignes de code.

### • Les Cells = Shape+Material

```
Shape_ptr Crayon(new Tube(H/2,r));
Shape_ptr EmptyBox(new Brick(a/2,a/2,a/2));

Crayon >> EmptyBox

Cell *crayon=new Cell(Crayon, UO2);
Cell *empty_box=new Cell(EmptyBox);
```

### • Les Materials

- Proportion : % mol, % mass, atom.cm<sup>-3</sup> ou atom/(barn.cm)
- Densité en : g.cm<sup>-3</sup>, atom.cm<sup>-3</sup> ou atom/(barn.cm)

```
Material *UO2 = new Material(500); // 500 K
UO2 ->SetDensity(10.4); // g.cm-3
UO2 ->AddNucleus(92, 235, 0.04);
UO2 ->AddNucleus(92, 238, 0.96);
UO2 ->AddNucleus(8, 16, 2.);
```

FIG. F.2: Construction des cellules dans MURE

### • Exemple de réseaux

```
Shape_ptr Coeur(new Tube(H/2,R));
Shape_ptr Extérieur(!Coeur);

Shape_ptr Maille(new Hexagon(H/2,CoteHexa));
Maille->SetUniverse();

Maille>>Coeur;

Shape_ptr Crayon(new Tube(H/2,r));
Crayon->SetUniverse();

Cell *coeur=new Cell(Coeur, H2O);
Cell *exterieur=new Cell(Extérieur,0,0);
Cell *crayon=new Cell(Crayon,UO2);
Cell *reseau=new Cell(Maille);
reseau->Lattice(2);
reseau->FillLattice(Crayon);
```

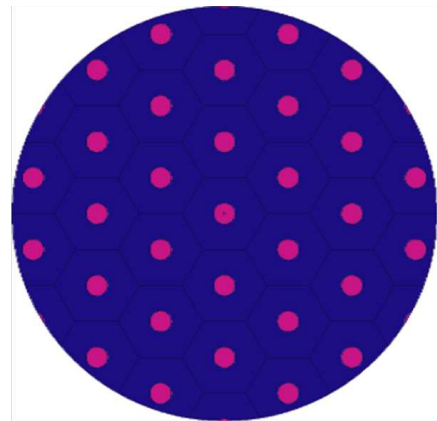


FIG. F.3: Exemple d'un réseau simple généré avec MURE

## Annexe G

# Exemple d'un jeu de données ReactorMesh et COBRA (MURE) pour un calcul couplé neutronique thermohydraulique avec le code COBRA

Le cahier des charges de ce travail de thèse imposait une facilité d'utilisation pour les études couplées neutronique thermohydraulique. Les classes ReactorMesh et COBRA ont été créées en ce sens.

Voici quelques exemples non exhaustifs de calculs couplés.

### Création de la géométrie : classe ReactorMesh

La création des matériaux demeure la même qu'avec MURE. Par contre les duplications des matériaux sont réalisées automatiquement pour la prise en compte des températures (et/ou des évolutions combustible). Nous allons voir comment créer un assemblage de type REP : réseau 17x17, puis nous allons augmenter la complexité.

### Assemblage REP sans tubes guides

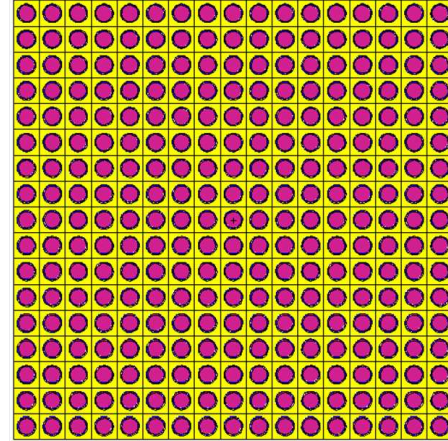
```
// Création de la zone à mailler
Shape_ptr StructureExtérieure
(new Brick(Largeur/2.0, Largeur/2.0, Hauteur/2.0));

// Création d'un objet de la classe ReactorMesh
ReactorMesh* Assemblage = new ReactorMesh
(# de zones radiales, # de niveaux axiaux);

// Déclaration de la zone à mailler
Assemblage-
>SetExternalShape(StructureExtérieure);

// Construction des crayons
Assemblage->SetDimensions(Rayon combustible,
Epaisseur de la gaine, Pas du réseau);
Assemblage->AddMaterials(Pastille combustible,
Gaine, Caloporteur);

// Création de la géométrie
Assemblage->CreateGeometry();
```



Si plusieurs niveaux axiaux sont nécessaire, il suffit d'en spécifier le nombre, toutes les duplications et manipulations sont réalisées automatiquement.

FIG. G.1: Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 1

### Ajout des tubes guides

```
// Déclaration des dimensions et compositions
Assemblage->SetGTDimensions
(Rayon interne, Epaisseur de la gaine);
Assemblage->AddGTMaterials
(Matériau interne, Matériau de la gaine);

// Positionnement des tubes (repère cartésien centré)
Assemblage->AddGuideTube(x,y);

Ex :
Assemblage->AddGuideTube(0,0);
Assemblage->AddGuideTube(0,3);
...
```

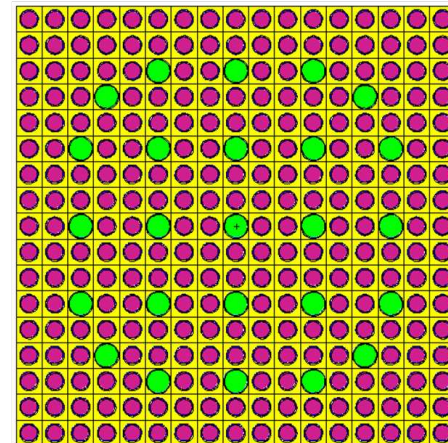


FIG. G.2: Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 2



### Ajout de crayons combustibles

```
// Exemple : création de zones manuellement
// Déclaration explicite des positions des crayons
Assemblage->AddPinPos(x, y, Numéro de zone);

// Exemple : ajout d'un crayon à deux niveaux
d'enrichissement ou muni d'un poison consommable
annulaire (cf. benchmark NEA)
// Déclaration des dimensions et compositions
Assemblage->SetSpecialDimensions(Rayon pastille,
Epaisseur gaine, Pas du réseau, Rayon zone interne);
Assemblage->SetSpecialMaterials(Matériau interne
de la pastille, Gaine, Caloporteur, Matériau externe
de la pastille);
// Déclaration explicite des positions des crayons
Assemblage->AddSpecialPin(x, y, Numéro de zone);

Ex :
Assemblage->AddPinPos(1, 1, 1);
Assemblage->AddSpecialPin(-1, -1, 2);
```

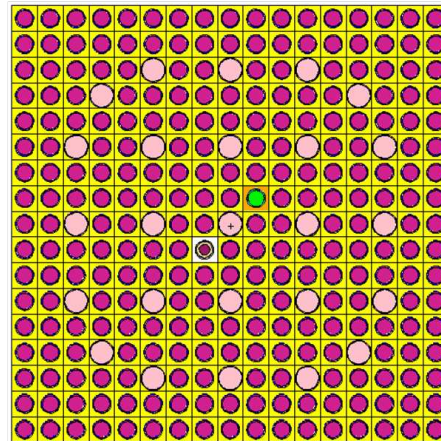


FIG. G.3: Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 3

### Ajout de barres de contrôle

```
// Déclaration des dimensions et compositions
Assemblage->SetCRDimensions(Rayon du poison,
Epaisseur gaine, Epaisseur de la lame de caloporteur,
Epaisseur gaine extérieure = tube guide);
Assemblage->SetCRMmaterials(Poison, Gaine,
Caloporteur, Gaine);
// Déclaration explicite des positions des barres
Assemblage->AddControlRod(x, y);

Ex :
Assemblage->AddControlRod(0, 0);
```

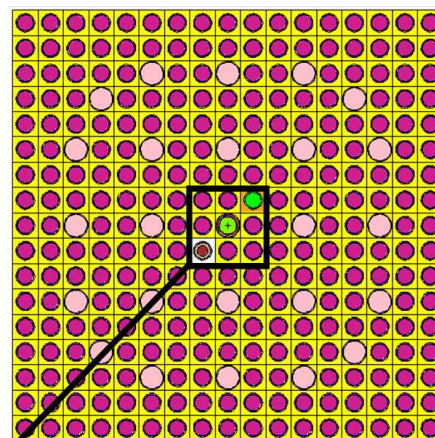
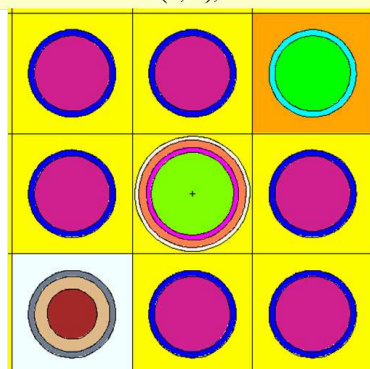


FIG. G.4: Création d'une géométrie avec ReactorMesh - 4



## Réalisation d'un calcul couplé avec la thermohydraulique (COBRA) : classe COBRA

### Couplage avec la thermohydraulique

```
// Création d'un objet COBRA et non plus ReactorMesh
COBRA* Assemblage = new COBRA
(# de zones radiales, # de niveaux axiaux);

// La seule nécessité est de spécifier quelques paramètres
de fonctionnement – en voici quelques exemples
// Température d'entrée du caloporteur
Assemblage->SetInletTemperature(Température);
// Débit masse
Assemblage->SetInletMassFlux(Débit);
// Concentration de bore en entrée
Assemblage->SetInletBoronConcentration([c]);
// Pression en sortie
Assemblage->SetExitPressure(Pression);
// Position des grilles
Assemblage->SetGridsPos(Position relative : z/H);
// Ajout des plénums
Assemblage->SetPlenum(Epaisseur);
```

Seules ces quelques précisions sont nécessaires  
pour le couplage avec le code COBRA

FIG. G.5: Calcul couplé avec la classe COBRA

L'avantage de réaliser une étude couplée avec le code 3D COBRA est la possibilité de prendre en considération des phénomènes physiques complexes<sup>1</sup> qui donnent accès à des résultats que le code BATH n'est pas en mesure de fournir.

En voici quelques exemples d'illustration :

<sup>1</sup>Calcul du coefficient d'échange thermique en fonction de la nature de l'écoulement, calcul des courants transverses pour les homogénéisation de quantité de masse et températures, ...

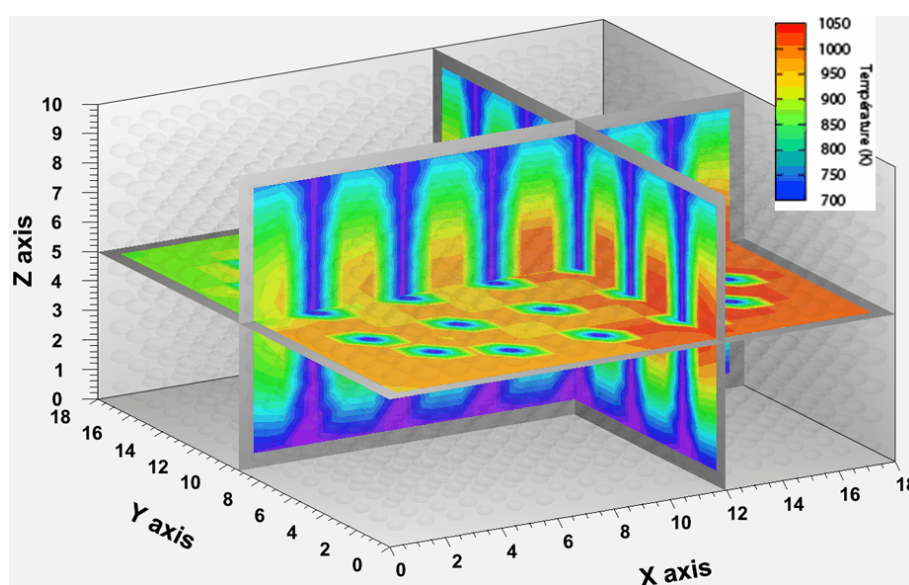


FIG. G.6: Illustration d'un calcul couplé avec COBRA : profils 3D de température rayon par rayon

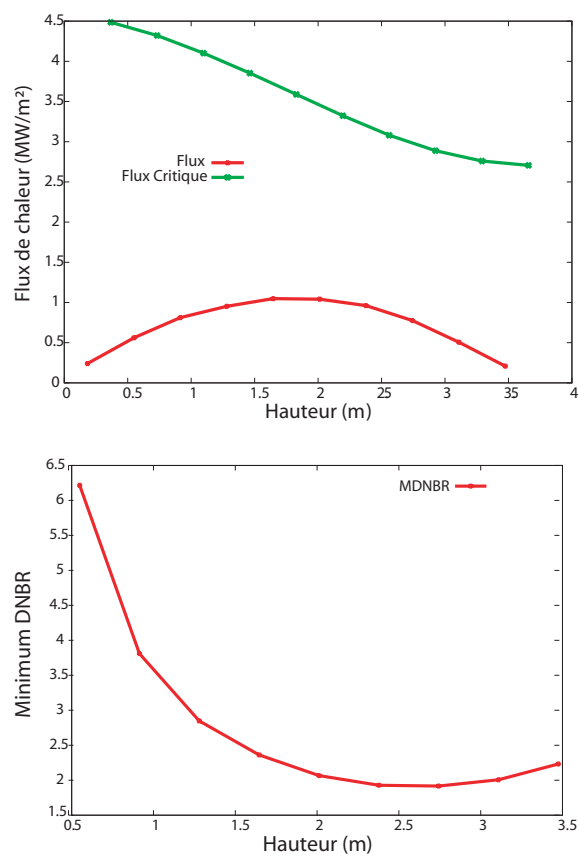


FIG. G.7: Illustration d'un calcul couplé avec COBRA : flux critique et minimum DNBR (Assemblage B2 - HFP)

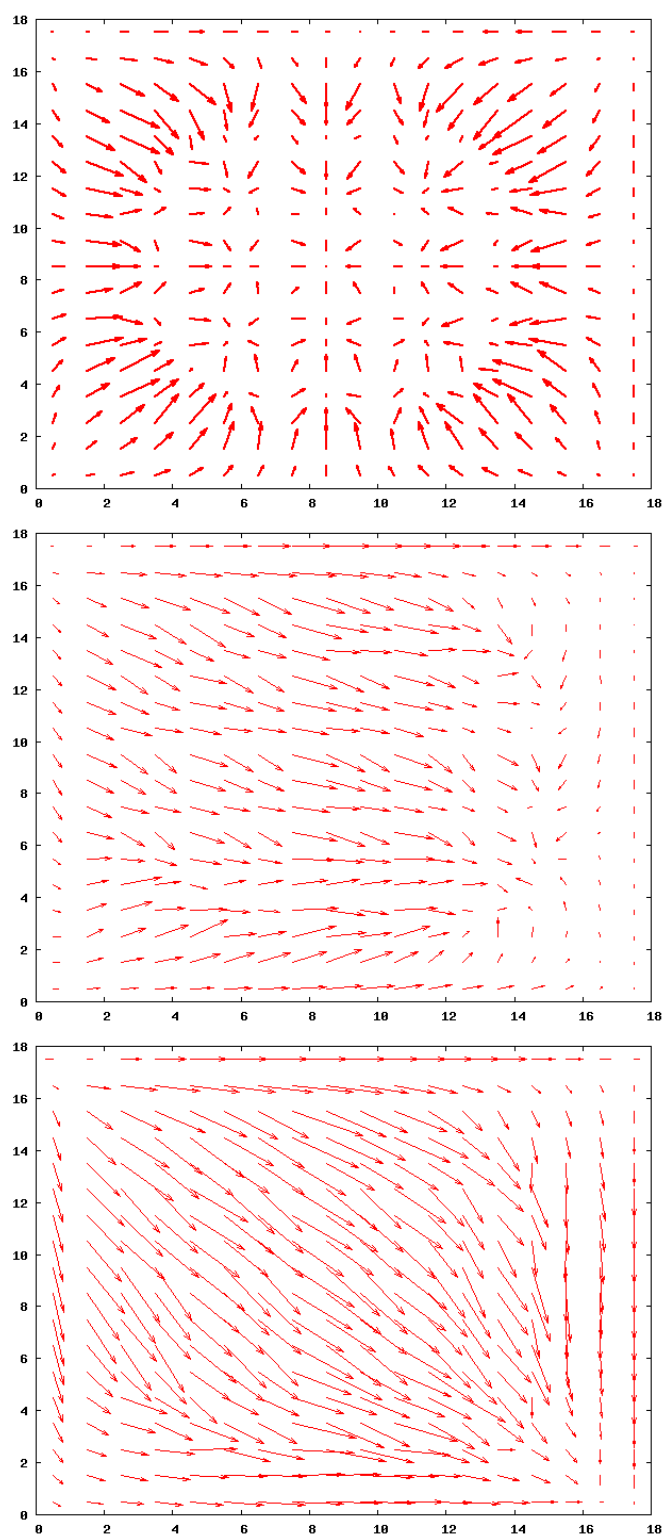


FIG. G.8: Illustration d'un calcul couplé avec COBRA : courants transverses à l'intérieur d'assemblages arbitraires. Les axes représentent les coordonnées X et Y des sous-canaux, et les vecteurs, la vitesse du fluide en déplacement d'un sous-canal vers un autre.

## Exemple de fichier d'entrée COBRA

Le fichier d'entrée MURE équivalent correspond à cent lignes de codes, le fichier d'entrée MCNP à plusieurs milliers de lignes, et le fichier d'entrée COBRA à un millier de lignes. Pour la partie COBRA, voici l'essentiel d'un fichier d'entrée tel qu'il est formaté automatiquement (voir les pages suivantes).

Westinghouse PWR MOX/UO2

```
$=====
$          CARD 2 : General Options
$=====
$ IQP3  ISIN  ISOUT  JTHMOD
   1      2      2      0
$=====
$          CARD 3 : General TH Parameters
$=====
$ IPILE NCHANL NROD NDX NCTYP NGRID NGRIDT NODESF IGCON IVEC2 NFUEL
1      324   289   10    4    0    0    5    0          1    2
$=====
$          CARD 4 : Axial Intervals
$=====
$ DX
-0.36577
$=====
$          CARD 5 : Linear Rod Powers
$=====
$ NAXP (J levels)
10
$ XTAB (level 1)
0.182885
$ QTAB
6060.75      5489.45      5489.45      5489.45      5489.45      5489.45
5489.45      5489.45      5489.45      5458.54      5458.54      5458.54
5458.54      5458.54      5458.54      5458.54      6305.6       5489.45
5489.45      5489.45      5489.45      5489.45      5675.89      5489.45
5489.45      5675.89      5458.54      5458.54      5843.93      5458.54
5458.54      5458.54      5458.54      5458.54      5489.45      5489.45
5489.45      5675.89      5675.89      0.          5675.89      5675.89
0.          5843.93      5843.93      0.          5843.93      5843.93
(...)
$ XTAB (level 2)
0.548655
$ QTAB
12720.7      12465.5      12465.5      12465.5      12465.5      12465.5
(...)
$=====
$          CARD 7 : Channel Connexion Data
$=====
$ NCN NCC GAPC DISTC NCC GAPC DISTC
  1      2 .00171.0094519 .00171.00945
  2      3 .001710.012620 .00343.00945
  3      4 .001710.012621 .00343.00945
  4      5 .001710.012622 .00343.00945
  5      6 .001710.012623 .00343.00945
  6      7 .001710.012624 .00343.00945
  7      8 .001710.012625 .00343.00945
  8      9 .001710.012626 .00343.00945
  9     10 .001710.012627 .00343.00945
 10     11 .001710.012628 .00343.00945
 11     12 .001710.012629 .00343.00945
 12     13 .001710.012630 .00343.00945
 13     14 .001710.012631 .00343.00945
 14     15 .001710.012632 .00343.00945
 15     16 .001710.012633 .00343.00945
 16     17 .001710.012634 .00343.00945
 17     18 .00171.0094535 .00343.00945
 18     36 .00171.00945
 19     20 .00343.0094537 .001710.0126
```

(...)

\$=====

\$ CARD 8 : Rod To Subchannel Connection Data

\$=====

\$ NRN IDFUEL LR PHI LR PHI LR PHI LR PHI

1	1	1	0.25	2	0.25	19	0.25	20	0.25
2	1	2	0.25	3	0.25	20	0.25	21	0.25
3	1	3	0.25	4	0.25	21	0.25	22	0.25

(...)

\$=====

\$ CARD 10 : Channel Data

\$=====

\$ N FRAC CHAR CHPW CHPH

1	1	2.31936e-05	0.00719896	0.00719896							
1	1	4.63872e-05	0.0143979	0.0143979							
2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
14	15	16	17	19	36	37	54	55	72	73	90
91	108	109	126	127	144	145	162	163	180	181	198
199	216	217	234	235	252	253	270	271	288	289	306
308	309	310	311	312	313	314	315	316	317	318	319
320	321	322	323								
1	1	9.27743e-05	0.0287958	0.0287958							
20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
32	33	34	35	38	39	40	41	44	47	50	51
52	53	56	57	62	65	70	71	74	75	78	79
80	81	82	83	84	85	88	89	92	95	98	101
104	107	110	113	116	119	122	125	128	129	130	131
132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143
146	149	152	155	158	161	164	167	170	173	176	179
182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	192	193
194	195	196	197	200	203	206	209	212	215	218	221
224	227	230	233	236	237	240	241	242	243	244	245
246	247	250	251	254	255	260	263	268	269	272	273
274	275	278	281	284	285	286	287	290	291	292	293
294	295	296	297	298	299	300	301	302	303	304	305

1	1	8.0694e-05	0.0310719	0.0215969							
42	43	45	46	48	49	58	59	60	61	63	64
66	67	68	69	76	77	86	87	93	94	96	97
99	100	102	103	105	106	111	112	114	115	117	118
120	121	123	124	147	148	150	151	153	154	156	157
159	160	165	166	168	169	171	172	174	175	177	178
201	202	204	205	207	208	210	211	213	214	219	220
222	223	225	226	228	229	231	232	238	239	248	249
256	257	258	259	261	262	264	265	266	267	276	277
279	280	282	283								

\$=====

\$ CARD 11 : Grid Position

\$=====

\$ GRIDXL IGRID

(!!! ceci est un jeu d'entrée pour les calculs du benchmark NEA : les grilles de maintien ne devaient pas être simulées !!!)

\$=====

\$ CARD 12 : Data for COBRA and TWIGL fuel heating models

\$=====

\$ DFUEL TCLAD RFUEL RCLAD DROD ETA

0.007902	0.000632	10970	6552	0.009166	0
----------	----------	-------	------	----------	---

\$ KFUEL CFUEL KCLAD CCLAD HGAP GAMMA

-1	-1	-1	-1	7000	0
----	----	----	----	------	---

\$ DFUEL TCLAD RFUEL RCLAD DROD ETA \*\* Guide Tube \*\*

0.011248	0.000408	10970	6552	0.012064	0
----------	----------	-------	------	----------	---

```

$ KFUEL CFUEL KCLAD CCLAD HGAP GAMMA  ** Guide Tube **
-1      -1      -1      -1      7000      0
$=====
$          CARD 14 : Hydraulic Model Indicators
$=====
$ N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8 NHTC ISAT
0      0      1      1      0      1      1      0      1      0
$=====
$          CARD 18 : Two Phase Friction Model
$=====
$ J4
1
$=====
$          CARD 20 : Void Friction Model
$=====
$ J2 J3 JSLIP
1      1      0
$=====
$          CARD 22 : Heat Transfer Model
$=====
$ IBC1 IBC2 IBC3 IBC4 IBC5 IBC6
0      0      0      4      0      0
$=====
$          CARD 26 : Parameters Section A
$=====
$ KIJ FTM SL THETA
10     0      0.5    0
$=====
$          CARD 26 : Parameters Section B
$=====
$ NCHF NCWC NUFC CGRID NCPR NTCPR RGE FPRC SPACNG
3      0      0      0.954 0      0      0      0      0
$=====
$          CARD 27 : Convergence Parameters
$=====
$
0      0      0      0      0      0      -1     0      0      0      0      1
$=====
$          CARD 29 : Operating Conditions
$=====
$ IH HIN GIN PEXIT DPS IPS FNORM CQ GINBP BORIN CQIN HOUT
1      560    2923.715.8  -1      1      1      0.08   2923.71680  0      0
$=====
$          CARD 30 : Time Data
$=====
$ TTIME  NDT  NSLUG  TSLUG
0      0      0      0
$=====
$          CARD 32 : Transient Parameters
$=====
$ NP NQ NBOR
0              0      0
$=====
$          CARD 36 : Output Printing
$=====
$ NSKIPX NSKIPT NOUT NPCHAN NPROD NPNODE NPLOT
0      0      3      0      0      0      1

```





## Annexe H

# Exemple d'un jeu de données MURE pour un calcul couplé neutronique thermohydraulique avec BATH

Le cahier des charges de ce travail de thèse imposait une facilité d'utilisation pour les études couplées neutronique thermohydraulique. Nous avons vu dans l'annexe précédente la facilité d'utilisation du code MURE avec les classes `ReactorMesh` et `COBRA` pour la construction d'une géométrie et son couplage avec la thermohydraulique.

Seulement, le code `COBRA`, en l'état actuel, ne permet la simulation que des écoulements en eau. C'est pourquoi le code simplifié `BATH` a été créé.

Cependant son utilisation est plus complexe. En effet, il revient à l'utilisateur de dupliquer tous les matériaux, structures et cellules.

Pour un couplage avec la thermohydraulique, l'utilisateur doit spécifier explicitement les zones radiales et les niveaux axiaux pour chaque groupe de cellules :

```
Cellule_1->SetTHLevelPosition(Numéro de niveau);  
Cellule_1->SetTHZonePosition(Numéro de zone);
```

Spécifier la zone est facultatif. Elle est nécessaire si un canal moyen par assemblage est par exemple requis, ou deux canaux moyens dans un même assemblage. Le code calculera en parallèle et de façon indépendante chaque canal moyen.

Ces deux indicateurs sont les seuls impératifs pour un couplage avec la thermohydraulique. En effet, l'actualisation des données liées à la thermique sont réalisées automatiquement (température de chaque structure, densités, ...).

Les données thermohydrauliques que l'utilisateur doit fournir au code sont un peu plus importantes que pour les calculs couplés au code `COBRA`, du fait que la géométrie est créée exclusivement par l'utilisateur et non pas par la classe `ReactorMesh`. Les informations sur les dimensions ou autres données structurelles sont donc inconnues pour le code `BATH`.

Voici la liste exhaustive des détails à fournir pour le couplage avec BATH (ces seuls paramètres sont nécessaires ; les calculs de périmètres chauffants, nombres adimensionnels ou autres nécessités sont réalisés automatiquement) :

```
// Création d'un objet BATH pour le couplage
ThermalCoupling* Canal_1 = new ThermalCoupling(Nombre de niveaux axi-
aux, Identification de la zone radiale, Numéro de l'itération neutron-
ique thermohydraulique);

// Par défaut la maille est carrée, si elle est hexago-
nale (cas des SFR) alors cette méthode doit être appelée
// Elle permet la détermination automatique du diamètre hy-
draulique équivalent
Canal_1->SetHexLattice();

// Dimensions des structures
Canal_1->SetRodRadius(Rayon de la pastille combustible);
Canal_1->SetInnerRodRadius(Rayon interne de la pastille com-
bustible); // Cas d'une pastille annulaire
Canal_1->SetCladRadius(Rayon de la gaine);
Canal_1->SetCellsHeight(Hauteur de la cellule élémentaire);
Canal_1->SetCellsSurface(Surface de la cellule élémentaire);

// Données thermohydrauliques
Canal_1->SetEnterCoolantTemp(Température d'entrée du caloporteur);
Canal_1->SetRodAveragePower(Puissance totale déposée dans le canal);
Canal_1->SetMassSpeed(Débit masse);

// Type de combustible (pour la sélection des grandeurs thermody-
namiques)
// Sont disponibles : UOX, MOX, ThO2
Canal_1->SetFuelType(Identifiant);

// Type de gaine (pour la sélection des grandeurs thermodynamiques)
// Sont disponibles : zircaloy, acier
Canal_1->SetCladdingType(Identifiant);

// Type de caloporteur (pour la sélection des grandeurs thermody-
namiques)
// Sont disponibles : eau légère, eau lourde, sodium
Canal_1->SetCoolantType(Identifiant);

// Lancement des calculs de thermohydraulique et mise à jour des don-
nées neutronique (températures, densités)
Canal_1->Run();
```

## Exemple de résultats pour un canal moyen de RNR caloporteur sodium

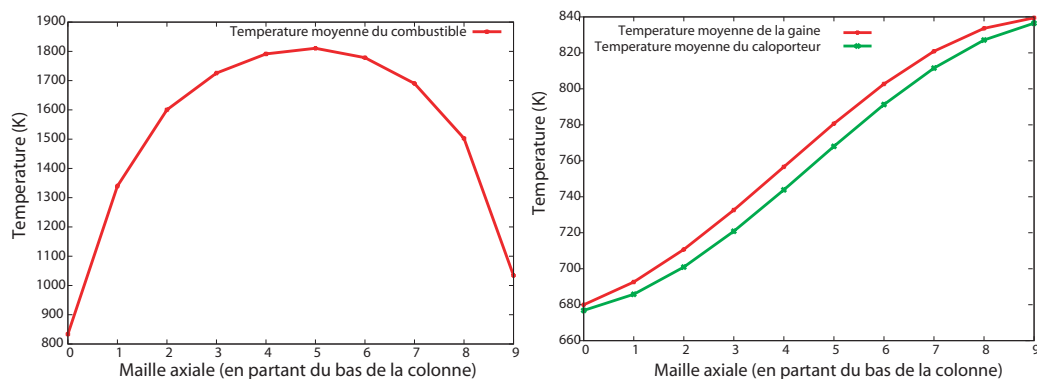


FIG. H.1: Températures moyennées

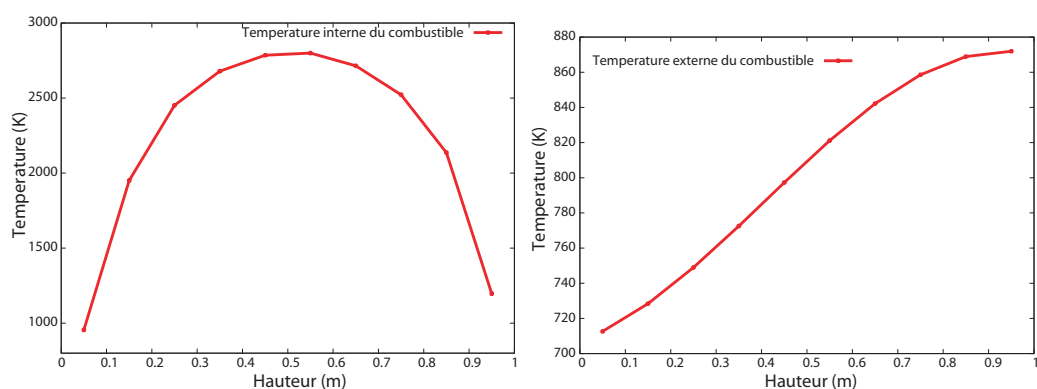


FIG. H.2: Températures du combustible intérieure et extérieure

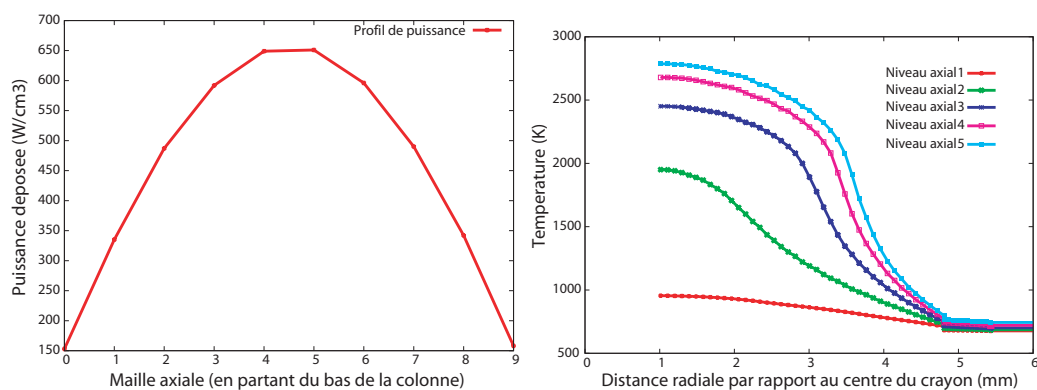


FIG. H.3: Profils axiaux de puissance et radiaux de températures



# Bibliographie

- [1] O. Méplan et al. MURE, MCNP Utility for Reactor Evolution. user guide - version 1.0. report lpsc 0912, report ipno-09-01, January 2009.
- [2] O. Méplan et al. MURE, MCNP Utility for Reactor Evolution, description of the methods, first applications and results. In *ENC proceedings Versailles France*, 2005.
- [3] X-5 Monte Carlo team. MCNP – a general Monte Carlo N-Particle transport code, version 5. Technical Report LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [4] EDF. Code SATURNE - le logiciel généraliste de mécanique des fluides numérique (CFD) développé par EDF.
- [5] Paul Reuss. *Précis de neutronique*. INSTN, 2003.
- [6] Fedon-Magnaud Christine. Résolution de l'équation de transport dans le code CRONOS. Technical report, CEA-N - 2751, 1994.
- [7] G. Rimpault et al. The ERANOS code and data system for fast reactor neutronic analyses. PHYSOR 2002.
- [8] Université Polytechnique de Montréal. Code DONJON.
- [9] V.G. Zimin and H. Ninokata. Nodal neutron kinetics code for LWR analysis. 1998 Annual Meeting of AESJ Osaka.
- [10] CRISSUE-S Partners, CRISSUE-S WP-1-Report : Neutronics/thermal-hydraulics coupling in LWR technology, data requirements and databases needed for transient simulations and qualifications (database), ISBN 92-64-02083-7, OECD (2004).
- [11] CRISSUE-S Partners, CRISSUE-S WP-2-Report : Neutronics/thermal-hydraulics coupling in LWR technology : State-of-art report (REAC-SOAR), ISBN 92-64-02084-5, OECD).
- [12] CRISSUE-S Partners, CRISSUE-S WP3-Report : Neutronics/thermal-hydraulics coupling in LWR technology, achievements and recommendations report (finances), ISBN 92-64- 02085-3, OECD (2004).
- [13] Downar T.J Miller, M.R. Completion report for the coupled TRACS-M/PARCS code, university of purdue, report PU/NE-99-20.
- [14] D et al. Lee. Analysis of the OECD/NRC BWR turbine trip transient benchmark with the coupled thermal-hydraulics and neutronics code TRAC-M/PARCS. *Nuclear Science and Engineering*, 148 :291–305, 2004.

- [15] Bousbia-Salah et al. Analysis of the peach bottom turbine trip 2 experiment by coupled RELAP-PARCS three-dimensional codes. *Nuclear Science and Engineering*, 148 :337–353, 2004.
- [16] Lucas D. Rohde U Grundmann, U. Coupling of the thermo-hydraulic code ATHLET with the neutron kinetic core model DYN3D. Proc. International Conf. on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analyses.
- [17] Lerchl G. Miro J. Teschendorff V. Wolfert K Burwell, M.J. The thermal hydraulic code ATHLET for Analysis of PWR and BWR Systems. Proceedings Fourth International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal hydraulics, 1989. Vol. 2, p 1234 1239.
- [18] P. Bellier M. Coste C. Magnaud S. Mengelle J. Ragusa R. Sanchez S. Santandrea Z. Stankovski R. Bonnion. *APOLLO 2 : Manuel de reference de la version 2.7*. CEA/SERMA/LENR/RT/04-3425/A, 2005.
- [19] S. Mengelle. *Manuel des procédures de la version 2.7*. CEA/SERMA/LENR/RT/04-3431/A, 2004.
- [20] P. Bellier M. Coste Delclaux A. Hebert R. Sanchez Z. Stankovski I. Zmijarevic. *APOLLO 2.5 : notice theorique*. CEA/SERMA/LENR/RT/99-2719/A, 2002.
- [21] G. Rimpault. Physics documentation of ERANOS and The ECCO cell code. Rapport Technique RT/SPRC/LEPh 97-001.
- [22] A. HEBERT G. MARLEAU and R. ROY. A user guide for DRAGON 3.05D. Technical report IGE-174 Rev, 2007.
- [23] Childs R. L Rhoades W. A. TORT-DORT, two- and three-dimensional discrete ordinates transport, version 2.7.3. Technical Report RSIC-CCC-543, ORNL RSICC, Oak Ridge, TN, 1993.
- [24] B. Delmarmol K. Kuefner and G. Minsart. DIAMANT-2 - continuous four-point triangular mesh difference schemes for the multigroup neutron transport equation,, 1979.
- [25] J.P. Both G. Naron De Surgy Y. Pananliau. *Notice d'utilisation du code TRIPOLI 4, version 4.1 : code de transport de particules par la methode Monte Carlo*. CEA/DMT/SERMA/LEPP/RT/98-2401/A.
- [26] L.J. Milton. VIM user guide.
- [27] CEA CATHARE. Code Avancé de THERmohydraulique pour les Accidents des Réacteurs à Eau.
- [28] RELAP5/MOD1/008, NESC no. 917.3033, RELAP5/MOD1/008 tape and implementation information. Technical report, National Energy Software Center Note 84-11, 1984.
- [29] Royer E. Rameau B. Todorova N Mignot, G. Computation of a BWR Turbine Trip with CATHARE-CRONOS2-FLICA4 coupled codes. *Nuclear Science and Engineering*, 148 :235–246, 2004.

- [30] D. Basile and E. Salina. *COBRA-EN an upgraded version of the COBRA-3C/MIT code for thermal-hydraulic transient analysis of light water reactor fuel assemblies and cores*. ENEL-CRTN compartimento di Milano, 1999.
- [31] Ph Fillon A. Bergeron G. Boudsocq S. Clerc D. Gallo O. Gregoire E. Royer. *FLICA4 v1.8, Guide de l'utilisateur*. CEA/DM2S/SFME/LETR/RT/projet/0.2.
- [32] Y.J. Yoo and D.H Hwang. MATRA, Multichannel Analyzer for steady states and Transients in Rod Arrays.
- [33] Schulenberg T. Bittermann D. Rau P Cheng, X. Design analysis of core assemblies for supercritical pressure condition. *Nuclear Engineering and Design*, 223 :279–294, 2003.
- [34] CEA - TRIOU. Simulation numérique en mécanique des fluides.
- [35] Fluent 5 users guide, fluent inc., lebanon, nh (1998); <http://www.fluent.com>.
- [36] CFX-4 user manual, 1997 AEA technology. <http://www.software.aeat.com/cfx.default.asp>.
- [37] C.w. stewart et al., "vipre-01 : a thermal-hydraulic analysis code for reactor cores," EPRI NP-2511-CCM (april 1983).
- [38] MURE : Package NEA 1845 - <http://www.nea.fr/abs/html/nea-1845.html>.
- [39] R.B. Firestone and V.S. Shirley. *Table of isotopes, 8th edition*. John Wiley and sons, 1996.
- [40] W. H. Press et al. *Numerical recipes in C++ : the art of scientific computing*. Cambridge University Press, 2002.
- [41] J. Brizi et al. Sodium cooled fast reactors : void coefficient and waste minimization. neutronics studies using MURE. In *Global 2009*, 2009.
- [42] Miss J. et al. First validation of the new continuous energy version of the MORET5 Monte Carlo code. In *PHYSOR 2008*, 2008.
- [43] C. Reed. *Convective heat transfer in liquid metals*. Engineering division - Argonne National Laboratory. Chapitre 1.
- [44] J.P. Cretta H. Nael. *Réacteurs a neutrons rapides refroidis au sodium*. Techniques de l'ingénieur BN3170, 2005.
- [45] E. Skupinski Tortel Vautrey. *Int J. Heat mass transfert*. Pergamon Press, 1965. vol. 8, p937-931.
- [46] Regis Durand Smet. Réacteurs à eau sous pression. Technical report, Techniques de l'Ingénieur, traité Génie nucléaire, BN3100.
- [47] G. Rodriguez. *Le caloporteur sodium*. Techniques de l'ingénieur BN3680, 2004.
- [48] J.K. Fink L. Leibowitz. *Thermodynamic and transport properties of sodium liquid and vapour*. Reactor engineering division, chemical technology division - Argonne National Laboratory, 1995.
- [49] <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>. Propriétés thermophysiques des systèmes fluides.



- 
- [50] <http://www.alleghenytechnologies.com/wahchang>. *ATI Wah Chang - Technical data sheet*.
- [51] <http://www.azom.com>. *Stainless Steel - Grade 316 - Properties, Fabrication and Applications*.
- [52] <http://www.insc.anl.gov/matprop/>. Insc material properties database.
- [53] Henri Bailly, Denise Menessier, and Claude Prunier. *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides - conception et comportement*. CEA Eyrolles, 1996.
- [54] T. Kozlowski and T.J. Downar. PWR MOX/UO<sub>2</sub> core transient benchmark, final report. Technical report, NEA - ISBN 92-64-02330-5, 2007.
- [55] Christophe Herer and Daniel Gallori. Thermohydraulique des réacteurs à eau sous pression. Technical report, Techniques de l'Ingénieur, traité Génie nucléaire, BN3050.
- [56] Idel'cik. *Mémento des pertes de charges*. Direction des études et recherche d'EDF, 1986.
- [57] L. Perrot. ENDF2ACE user guide. Technical report, Notes de postdoctorat - IPN.
- [58] NJOY 91. Nuclear data processing system.
- [59] W. Haeck and N. Leclaire. Thermal scattering data and critically safety. In *International conference on the physics of reactors, PHYSOR 2008, Interlaken, Switzerland*, 2008.
- [60] F.B. Brown et al. Monte Carlo - advances and challenges. workshop presentation at the 2008 ANS reactor physics division topical meeting. In *PHYSOR 2008, Interlaken, Switzerland*, 2008.
- [61] T. Ueki and F.B. Brown. Stationarity diagnostics using shannon entropy in Monte Carlo critically calculations i : F test. In *American nuclear society 2003 winter meeting*, number LA-UR-03-3949, 2003.
- [62] T. Ueki et al. Time series analysis of Monte Carlo fission sources : I. dominance ratio computation. *Submitted to Nuclear Science and Engineering*, (LA-UR-03-5823).
- [63] T. Ueki and F.B. Brown. Informatics approach to stationarity diagnostics of the Monte Carlo fission source distribution. In *American Nuclear Society 2003 winter meeting*, number LA-UR-02-3783, 2003.
- [64] M. Christienne. Coupled TORT-TD/CTF capability for high fidelity LWR core calculations. Master's thesis, ENSPG, 2009.
- [65] Stevan Pilarski. *Etude du potentiel de concepts innovants de réacteurs à neutrons rapides (RNR) vis-a-vis des exigences du développement durable*. PhD thesis, Université Paris XI, 2008.
- [66] M.M. Bretscher. Evaluation of reactor kinetic parameters without the need for perturbation codes. In *International RERTR meeting, Jackson Hole, Wyoming*, 1997.

- 
- [67] B. Verboomen et al. Monte Carlo calculation of the effective neutron generation time. *Annals of nuclear energy*, 33 :911–916, 2006.
- [68] J.L. Lecouey. Some preliminary calculations using the file gunall provided by SCK-CEN. Technical report, LPC Caen, 2009.
- [69] S.A.H. Fegghi et al. Calculation of the importance-weighted neutron generation time usign MCNIC method. *Annals of nuclear energy*, 35 :1397–1402, 2008.
- [70] H. Ferroukhi and M.A. Zimmermann. Study of the PWR REA pulse width for realistic UO<sub>2</sub> and MOX core designs using 3D kinetics methods. *Annals of nuclear energy*, 36 :1170–1183, 2009.
- [71] J.E. Cahalan and K.O. Ott. Delayed neutron data for fast reactor analysis. *Nuclear Science Engeneering*, 50 :208, 1973.
- [72] R.K. Meulekamp et al. Calculating the effective delayed neutron fraction with monte carlo. *Nuclear Science and Engineering*, 152 :142–148, 2006.
- [73] D.L. Hetrick. *Dynamics of nuclear reactors*. American nuclear society, 1993.
- [74] K.O. Ott and R.J. Neuhold. *Nuclear reactor dynamics*. American nuclear society, 1985.
- [75] A.E. Waltar and A.B. Reynolds. *Fast breeder reactors*. American nuclear society, 1981.
- [76] Robert Barjon. *Physique des réacteurs nucléaires*. Number ISBN 2-7061-0508-9. Institut des Sciences Nucléaires de Grenoble, 1993.
- [77] T. Sathiyasheela. Power series solution method for solving point kinetics equations with lumped model temperature and feedback. *Annals of nuclear energy*, 36 :246–250, 2009.



## **Couplage 3D neutronique thermohydraulique**

### **Développement d'outils pour les études de sûreté des réacteurs innovants**

Les études relatives aux réacteurs nucléaires font appel à plusieurs disciplines dont les principales sont la neutronique et la thermo-hydraulique. Les phénomènes physiques qui se déroulent dans le cœur d'une centrale nucléaire comme la réaction en chaîne des fissions nucléaires, le mouvement des fluides et les transferts de chaleur se couplent de manière forte et complexe. De part l'avancement des connaissances dans ces disciplines et la croissance massive de la puissance des ordinateurs, cette complexité phénoménologique peut aujourd'hui être simulée en des temps raisonnables. C'est pour cette raison que les codes de neutronique stochastiques, dits Monte Carlo, sont bien plus utilisés de nos jours que par le passé. Un grand intérêt de ce type de code probabiliste réside dans leur aptitude à reproduire "fidèlement" la réalité sans recours à des approximations de modélisation. C'est dans ce contexte que cette thèse a été initiée : coupler un code Monte Carlo de neutronique à un code de thermo-hydraulique cœur afin d'assurer une description la plus précise possible des conditions de fonctionnement d'un cœur de réacteur nucléaire. Ces travaux s'inscrivent dans une démarche évolutionnaire motivée par les exigences accrues de la sûreté, d'optimisation des ressources et de minimisation des déchets pour les systèmes nucléaires du futur. Ce manuscrit présente la méthodologie employée pour le développement d'un couplage externe automatisé entre le code Monte Carlo MCNP et le code de thermo-hydraulique/thermique COBRA-EN. Cette recherche d'une meilleure performance et précision des outils de calcul s'accompagne de nouveaux types de problèmes physico-numériques à résoudre, dont les principaux sont exposés dans ce mémoire. La validation du schéma couplé a été réalisée sur un cas très complexe de cœur de réacteur et a permis de prouver la robustesse des développements entrepris et la faisabilité d'un tel couplage.

## **3D coupling of Monte Carlo neutronics and thermal-hydraulics calculations**

### **as a simulation tool for innovative reactor concepts**

Nuclear reactors are complex systems and modelling of their behaviour involves several sub-disciplines of physics. The most important are the neutronics, which governs the neutron transport and chain reaction in the core, and thermo-hydraulics, which treats the fluid flow of the coolant and the heat transfer from the fuel. These two different physical phenomena are coupled in reactor cores in a complex way : The fission chain reaction affects the heat produced and hence fuel and coolant temperatures and densities, and in turn, these affect the cross sections for the nuclear reactions. Thanks to the massive growth in computer power over the last few decades it is only now that it is possible to imagine to simulate this phenomenological complexity in a reasonable time. For this reason stochastic neutronics codes of the "Monte-Carlo" type are used much more widely than in the past. They offer the great advantage of the ability of this type of probabilistic code resides in their ability to reproduce to "faithfully" re-produce reality without recourse to modeling approximations. It is in this context that the following thesis work has been performed : a generic coupling of a Monte-Carlo based neutronics code to a thermo-hydraulics code to ensure the most accurate 3-dimensional description possible of operating conditions in a reactor core. This work is driven by the new demands for future reactor generations of increased security, the optimization of natural resources and the minimization of nuclear waste production. This manuscript presents the methodology for the development of an automated external coupling between the Monte Carlo based neutron transport code, MCNP, and the thermo-hydraulique/thermique code, COBRA-EN. The development these new and high precision simulation tools was accompanied with new physical-numeric problems which had to be solved. The problems encountered are highlighted in the manuscript. Finally, the validation of the coupled scheme was carried out on a complex, heterogenous benchmark in order to prove the robustness of the code developments undertaken and the feasibility of such a coupling.